

UNIVERZITA PALACKÉHO V OLMOUCI
KATEDRA OPTIKY

KVANTOVÁ FYZIKA

Zdeněk Hradil



Programem L^AT_EX zpracoval:
Miroslav Kovařík

Sylabus přednášky Kvantová fyzika

1. Experimenty, které stály u zrodu kvantové teorie: fotoefekt, Comptonův rozptyl, Ritzův kombinační princip, Franck–Hertzův experiment, záření absolutně černého tělesa a Planckův zákon, Stern–Gerlachův experiment, difrakce a interference částic. Vysvětlení na základě nových postulátů (částicová povaha světla, vlnové chování částic, existence diskretních energetických hladin látky, spin jako kvantování impulsmomentu).
2. Stern–Gerlachův experiment jako základ pro zavedení kvantového stavu. Analogie s polarizací v klasické optice, analýza sekvenčních měření, filtrace stavů. Diracova symbolika bra a ket stavů, skalární součin. Operátory a operace s nimi (komutátor, stopa, reprezentace v Diracově symbolice), vlastní stavy samosdružených operátorů, maticové reprezentace v různých bazích, unitární ekvivalence, diagonalizace. Měření a jeho kvantový popis, pravěpodobnost a střední hodnota měřitelných veličin, relace úplnosti, kompatibilní a nekompatibilní měření, relace neurčitosti.
3. Pozorovatelné se spojitým spektrem, X-P reprezentace, vlnová funkce, generátor translace, Heisenbergovy relace neurčitosti, gaussovský “vlnový balík”, kanonické komutační relace a jejich vztah ke klasickým Poissonovským závorkám.
4. Dynamika kvantových systémů, Hamiltonián jako generátor posunutí v čase, Schrödingerova rovnice pro stav a evoluční operátor, řešení pro Hamiltonián nezávislý na čase. Vlastní stavy Hamiltoniánu (stacionární stavy) a nestacionární stavy. Schrödingerova a Heisenbergova reprezentace časového vývoje, aplikace na částici v potenciálním poli, souvislost s klasickou mechanikou, Ehrenfestův teorém.
5. Schrödingerova vlnová rovnice, rovnice kontinuity, semiklasické přiblížení, WKB aproximace, kvalitativní popis vlastností stacionárních řešení Schrödingerovy rovnice v 1D, oscilační věta. Harmonický oscilátor a formální řešení, zavedení anihilačních a kreačních operátorů, operátor počtu částic, evoluce, koherentní stavy.
6. Propagátor, Greenova funkce, Feynmanův drahový integrál, kalibrační transformace pro skalární a vektorový potenciál, interference indukovaná gravitačním polem, Hamiltonián nabitě částice v elektromagnetickém poli.

7. Kvantová teorie impulsmomentu (úhlového momentu). Generátory grupy rotací, rotace pro částici se spinem $1/2$, vlastní hodnoty a vlastní stavy impulsmomentu, ireducibilní reprezentace grupy rotací, orbitální úhlový moment, kulové funkce jako x - p reprezentace vlastních stavů impulsmomentu.
8. Symetrie v kvantové mechanice. Operátor parity. Využití symetrie pro řešení úloh kvantové mechaniky: atom vodíku.
9. Poruchová teorie s časově nezávislou poruchou pro nedegenerované a degenerované spektrum vlastních stavů neporušeného systému. Časově závislá poruchová teorie, Fermiho zlaté pravidlo. Příklady: maser, fotoefekt.
10. Identické částice v kvantové teorii. Princip nerozlišitelnosti, operátor permutace, vztah mezi spinem a statistikou. Stacionární stavy dvou identických částic v centrálním poli, výměnná interakce.

Doporučená literatura

1. Sakurai, J.J. : Modern Quantum Mechanics, Addison Wesley (1994)
2. Greiner, W. : Quantum Mechanics I, Springer (1989)
3. Formánek, J. : Úvod do kvantové teorie
4. Landau - Lifšic : Quantum Mechanics
5. Ballentine, L. E. : Quantum Mechanics: A Modern Development, (World Scientific 1998)
6. skripta : PřF UP, MFF UK Praha

Lekce 1: Základní experimenty kvantové mechaniky

Koncepční otázky kvantové teorie:

Fyzika zavádí nové teorie tehdy, když experimentální technika umožňuje natolik přesné experimenty, že je možné překonat úroveň přesnosti předcházející teorie.

- Klasická fyzika: makroskopické jevy (běžná zkušenost \sim Vesmír)
- Mikroskopická teorie: nesoulad klasického vysvětlení s realitou (stabilita atomu, šíření světla)

Příčina odlišnosti kvantové a klasické teorie:

- diskrétní struktura hmoty (atomy)
- náhodnost jevů (statistická fyzika)

Spojité vs. diskrétní pohled (dualita)

Kodaňská interpretace kvantové mechaniky (N. Bohr)

Důsledky:

-nemožnost individuálních předpovědí

-nekompatibilita měření, princip komplementarity

-kauzalita ano, determinismus ne

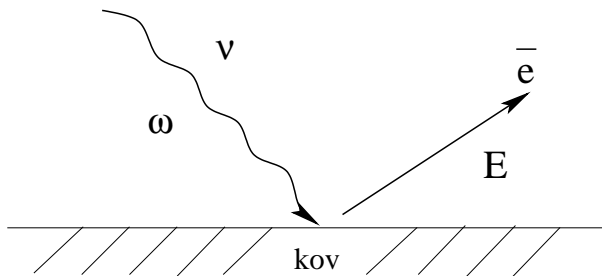
-Bellovy nerovnosti: kvantová mechanika není lokální realistická teorie se skrytými parametry = základ kvantové informatiky

Historické experimenty kvantové teorie:

Počáte 20. století: finální formulace klasické elektrodynamiky, termodynamiky a statistické fyziky

1) Fotoelektrický jev:

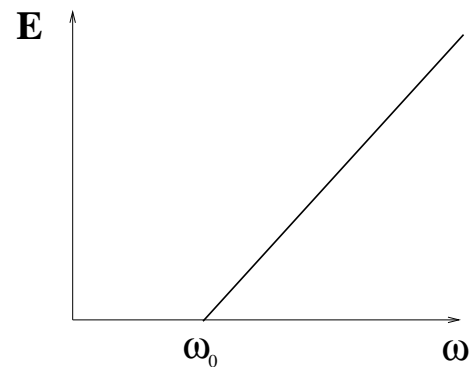
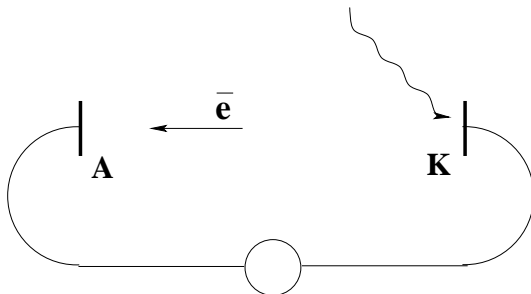
H.Hertz 1887 (objev), Philipp Lenard 1902 (měření energie eV), A. Einstein 1905 (teoretické objasnění) - závislost energie E na frekvenci ω



$$E = a + b\omega \quad [\text{eV}]$$

$$b = \hbar \equiv \frac{h}{2\pi},$$

$$h = 6.6 \cdot 10^{-34} \quad [J \cdot s]$$



Zvláštnosti, které nevysvětluje klasická teorie:

- E nezávisí na I
- E závisí na ω

Kvantové vysvětlení fotoelektrického jevu - Einstein (1905)

světlo je tvořeno fotony, které představují diskrétní kvanta energie, klidová hmotnost fotonu je nulová, jeho energie je daná disperzními relacemi

$$E^2 = (m_0c^2)^2 + p^2c^2 = \hbar^2\omega^2$$
$$\vec{p} = \hbar\vec{k} \quad ; \quad p = \hbar\frac{\omega}{c}$$

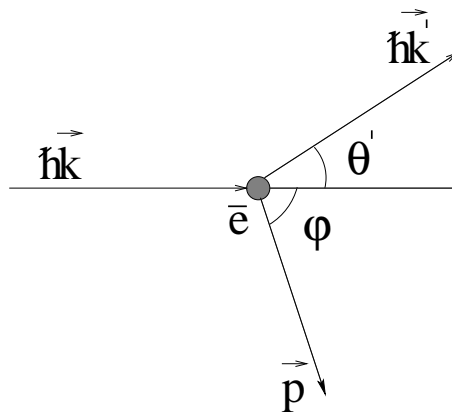
de Brogliho materiálové vlny, de Brogli (1923)

Materiálové vlny představují jev, který je inverzní vůči fotoefektu, tj. jestliže se světlo chová jako částice, částice se mohou chovat jako vlny
Experiment: Davison, Germer 1927 - difrakce elektronů na krystalu Ni

2) Comptonův efekt

- 1923 Compton (+ Debye), = závislost frekvence rozptýleného Rentgenova záření na úhlu rozptylu \rightarrow rozpor s vlnovou teorií

Vysvětlení kvantové teorie: záření se chová jako částice



$$\hbar\omega + m_0c^2 = \hbar\omega' + \frac{m_0c^2}{\sqrt{1 - (\frac{v}{c})^2}}$$

$$\hbar \vec{k} = \hbar \vec{k}' = \frac{m_0 \vec{v}}{\sqrt{1 - \left(\frac{v}{c}\right)^2}}$$

$$\iff \hbar k = \hbar k' \cos \theta' + \frac{m_0 \vec{v}}{\sqrt{1 - \left(\frac{v}{c}\right)^2}} \cos \varphi \quad \text{a} \quad \hbar k' \sin \theta' = \frac{m_0 \vec{v}}{\sqrt{1 - \left(\frac{v}{c}\right)^2}} \sin \varphi$$

Pak

$$\left. \begin{aligned} (k - k' \cos \theta')^2 &= \frac{1}{\hbar^2} \frac{(m_0 \vec{v})^2}{1 - \left(\frac{v}{c}\right)^2} \cos^2 \varphi \\ k'^2 \sin^2 \theta' &= \frac{1}{\hbar^2} \frac{(m_0 \vec{v})^2}{1 - \left(\frac{v}{c}\right)^2} \sin^2 \varphi \end{aligned} \right\} \oplus$$

⋮

Tedy,

$$\lambda' - \lambda = 2\lambda_c \sin^2 \frac{\theta'}{2}, \quad \text{kde}$$

$$\lambda_c = \frac{h}{m_0 c} = \frac{2\pi \hbar}{m_0 c} \quad \dots \quad \text{Comptonova vlnová délka}$$

$$m_0 = m_e = 9 \cdot 10^{-31} \text{kg}$$

$$\lambda_c = \frac{6 \cdot 10^{-34}}{3 \cdot 10^8 \cdot 9 \cdot 10^{-31}} \simeq 2 \cdot 10^{-12} \text{m} = 0.02 \text{ \AA}$$

změna energie:

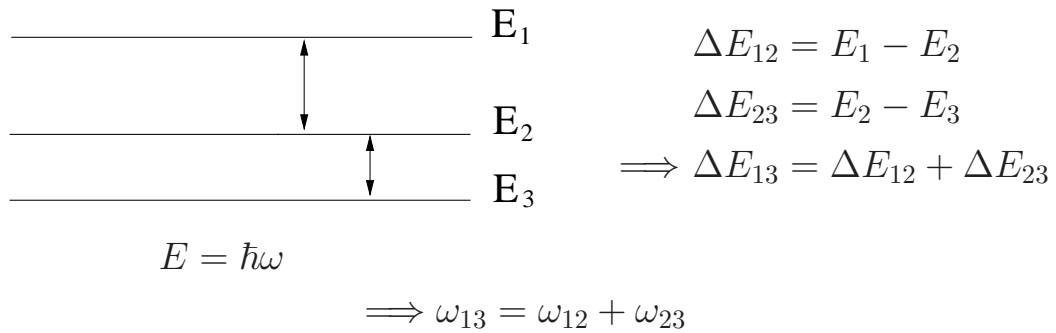
$$\Delta T = \hbar \omega = \hbar \omega' = 2\pi \hbar c \left(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda'} \right) = \hbar \omega \cdot \frac{2\lambda_c \sin^2 \frac{\theta'}{2}}{\lambda + 2\lambda_c \sin^2 \frac{\theta'}{2}}$$

efekt nastává pro Röntgenovo a γ záření.

3) Ritzův kombinační princip, 1908

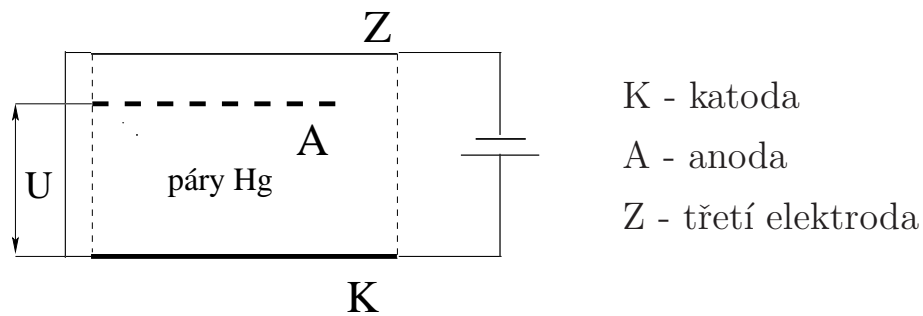
Empirické pravidlo pro hledání čar ve spektrech

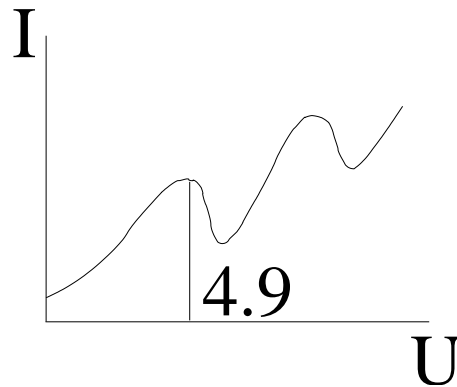
- Nové spektrální čáry jsou dány jako součet (rozdíl) frekvencí již známých čar!



4) Franck - Hertzův experiment, (1913)

nepružný rozptyl \bar{e} na atomech Hg v triodě
volt-ampérová charakteristika vykazuje rezonance





4.9 V - ionizace Hg

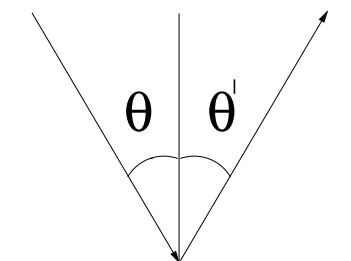
5) Záření absolutně černého tělesa,

M. Planck, "oficiální" datum vzniku kvantové teorie 14.12.1900

Planckův zákon \equiv geniální interpolace mezi Rayleigh - Jeansovým a Wienovým zákonem

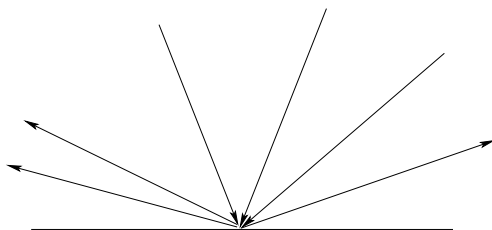
K objasnění záření černého tělesa je třeba vyjasnit základní mechanismy interakce záření a hmoty:

Regulární odraz (Maxwell. elmag. teorie)



$$\theta = \theta' \quad \text{Snellův zákon}$$

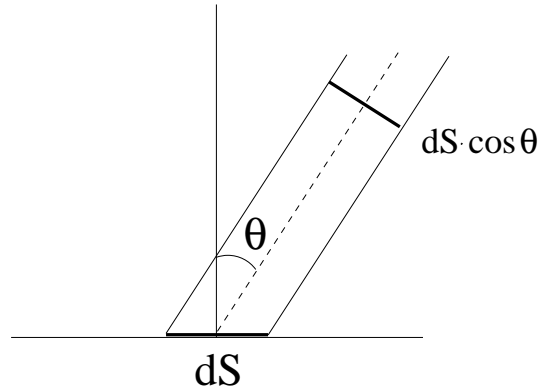
Difuzní odraz \rightarrow "odražené" záření nezávisí na směru dopadu



"šedý" zářič
 bílý zářič ... nic se neztratí
 černý zářič ... vše je absorbováno.

Lambertovský zářič:

$$\begin{array}{l} \text{zářivý tok } d\Phi \\ \text{na frekvenční úhel } d\omega \end{array} = \mathcal{J}(\omega, T) \cos \theta \, dS d\Omega d\omega$$



- dS ... elementární plocha, kterou $d\Phi$ prochází
 $d\Omega$... prostorový úhel, pod nímž vidíme dS od zdroje záření
 $d\omega$... velikost změny frekvence záření, které prochází dS
 $\mathcal{J}(\omega, T)$... svítivost

pro lambertovský zářič je $\mathcal{J}(\omega, T)$ konstantní

záření v dutině \equiv termodynamická rovnováha procesů absorpce a emise!

$\rho(\omega, T)$... hustota energie vytažená na objem a interval frekvencí
($\omega, \omega + d\omega$)

$\rho = \frac{S}{c}$... ($\vec{j} = \vec{v} \cdot \rho$) – analogie

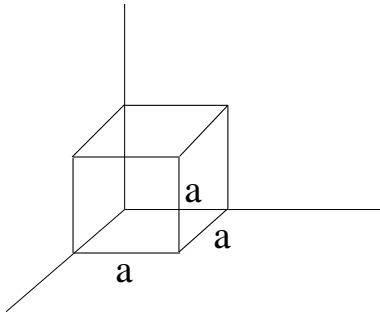
$$\begin{aligned} \rho(\omega, T) d\omega &= \int d\Omega \cdot \frac{2\mathcal{J}(\omega, T) d\omega}{c} \\ \implies \rho(\omega, T) &= \frac{8\pi}{c} \cdot \mathcal{J}(\omega, T) \end{aligned}$$

využito izotropie a homogenity záření absolutně černého tělesa a jeho nezávislosti na složení látky,

Kirchhoffův teorém:
$$\frac{E}{V} = \int \rho(\omega, T) d\omega$$

Modely pro spektrální hustotu:

- 2 kroky: 1) spočítat "počet řešení vlnové rovnice"
 2) sečíst jejich energií



$$\square \vec{A} = 0 \quad \left(\Delta - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right)$$

$$\text{div} \vec{A} = 0$$

$$\vec{A}(\vec{r}, t) = \vec{A}(\vec{r}) e^{i\omega t}$$

$$\vec{A}(\vec{r}) = \vec{A}_0 \cdot \sin \vec{k} \vec{r} \quad \dots \quad \text{podmínka pro stojaté vlny}$$

$$\vec{A}_0 \vec{k} = 0$$

$$\sin(k_x a) = \sin(k_y a) = \sin(k_z a) = 0$$

$$k_x = \frac{n_x \pi}{a}; \quad k_y = \frac{n_y \pi}{a}; \quad k_z = \frac{n_z \pi}{a}$$

$$dn_x dn_y dn_z \equiv d^3 n \quad \dots \quad \text{infinitesimalní počet řešení}$$

$$d^3 n = \frac{1}{8} 4\pi n^2 dn = \frac{\pi}{2} \cdot \left(\frac{a}{\pi^3} \right) k^2 dk =$$

$$= \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{\pi^2 c^3} V \omega^2 d\omega \cdot \boxed{2} = \frac{V}{\pi^2 c^3} \omega^2 d\omega,$$

kde 2 v rámečku značí počet polarizovaných stavů.

$$\frac{1}{V} \frac{dE}{d\omega} = \frac{1}{V} \frac{dN}{d\omega} \cdot \varepsilon, \quad \text{přičemž}$$

ε ... energie odpovídající danému modu čili řešení

$\varepsilon = k_B T$... platí pro termodynamickou rovnováhu a nízké teploty T,
tzv. **ekvipartiční teorém**

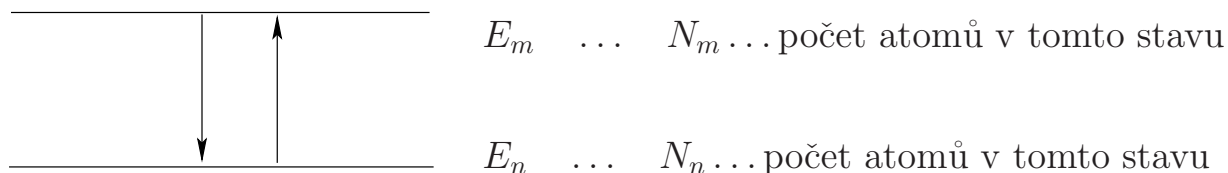
Pro vysoké energie (vzhledem k $k_B T$) platí:

$$\varepsilon = \hbar\omega \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right) \quad \dots \quad \text{barometrická formule, Boltzmanovo rozdělení}$$

$$\rho(\omega, T) = \begin{cases} \text{nízké energie, } (\frac{\hbar\omega}{k_B T} \rightarrow 0) & k_B T \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} \quad (\text{Rayleigh - Jeans zákon}) \\ \text{libovolné energie} & ? \\ \text{vysoké energie, } (\frac{\hbar\omega}{k_B T} \rightarrow \infty) & \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3} \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right) \quad (\text{Wienův zákon}) \end{cases}$$

Odvození Planckova zákona I : Einsteinova teorie A,B koeficientů, 1916

Podmínky mikroskopické rovnováhy:



dW_e ... pravděpodobnost emise fotonu do prostorového úhlu $d\Omega$

dW_a ... absorpce

$$dW_e = a_m^n d\Omega + b_m^n \rho(\omega, T) d\Omega$$

samovolná indukovaná
emise emise

$$dW_a = b_n^m \rho(\omega, T) d\Omega$$

Rovnováha: počet \uparrow = počet \downarrow

$$N_n (b_n^m \rho) d\Omega = N_m (a_m^n + b_m^n \rho) d\Omega, \text{ pak}$$

$$\frac{N_n}{N_m} = \frac{e^{-\frac{E_n}{k_B T}}}{e^{-\frac{E_m}{k_B T}}} = e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}}, \text{ kde}$$

$$\hbar\omega = E_m - E_n$$

$$T \rightarrow \infty \implies b_m^n = b_n^m$$

$$\rho(\omega, T) = \frac{a}{b} \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}} - 1}$$

$$\frac{\hbar\omega}{k_B T} \rightarrow 0$$

$$\rho(\omega, T) = \frac{a}{b} \frac{k_B T}{\hbar\omega}$$

integrací přes prostorový úhel

$$\rightarrow \frac{a}{b} \frac{k_B T}{\hbar\omega} (8\pi) \xrightarrow{R.J.} k_B T \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3}$$

$$\implies \frac{a}{b} = \frac{1}{8\pi^3} \frac{\hbar\omega^3}{c^2}$$

Pak

$$\rho(\omega, T) = \frac{1}{8\pi^3} \frac{\hbar\omega^3}{c^2} \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}} - 1}$$

Odvození Planckova zákona II:

„Planckova geniální interpolace“ → je použit evidentní předpoklad kvantové teorie pro diskretní energie

$$\varepsilon_n = n \cdot \hbar\omega \quad ; \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

obsazeno s pravděpodobností $\sim e^{-\frac{\varepsilon_n}{k_B T}}$

$$\bar{\varepsilon} = \frac{\sum \varepsilon_n e^{-\frac{\varepsilon_n}{k_B T}}}{\sum e^{-\frac{\varepsilon_n}{k_B T}}}$$

Nechť $\beta = \frac{1}{k_B T}$

Pak $\bar{\varepsilon} = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z$, kde

$$Z = \sum e^{-\beta \varepsilon_n} \quad (\text{tzv. partiční suma})$$

$$\implies Z = \frac{1}{1 - e^{-\beta \hbar \omega}} \quad ; \quad \bar{\varepsilon} = \frac{\partial}{\partial \beta} \ln (1 - e^{-\beta \hbar \omega})$$

Tedy,

$$\bar{\varepsilon} = \frac{-(-)\hbar\omega e^{-\beta\hbar\omega}}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}} = \boxed{\frac{\hbar\omega}{e^{\beta\hbar\omega} - 1}} !$$

$$\frac{\bar{\varepsilon}}{\hbar\omega} = \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega} - 1} \dots \text{„počet fotonů“ v daném stavu}$$

Lekce 2: Spin elektronu a formalismus kvantové mechaniky

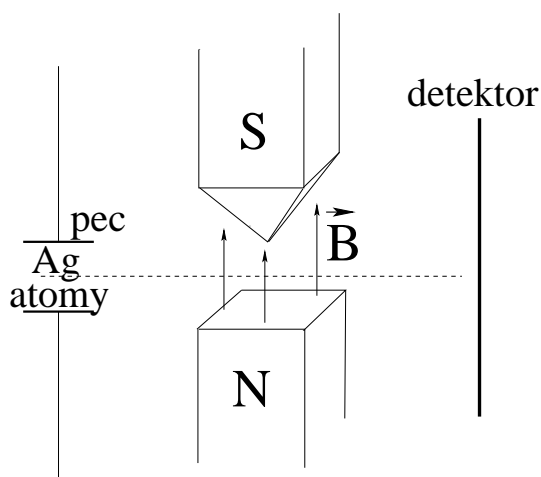
Goudsmit, Uhlenbeck, 1925

- \bar{e} má vnitřní moment hybnosti, jeví magnetický moment (\equiv spin)

$$\begin{aligned}\mu &= \frac{e\hbar}{2m_e} \quad [\text{SI}] \quad - \text{Bohrův magneton} \\ &= \frac{e\hbar}{2m_e c} \quad [\text{CGS}]\end{aligned}$$

Stern - Gerlach

1922



$$\vec{F} = -grad(-\vec{\mu} \cdot \vec{B})$$

$$F_z = \mu \cdot \frac{\partial B}{\partial z}$$

(interakční energie) $U = \frac{1}{2} \vec{H} \cdot \vec{B}$;

$$B = \mu_0(\vec{H} + \vec{M})$$

měření spinu \rightarrow klasické očekávání: $S \in (-|\mu|, +|\mu|)$
 kvantový výsledek: $\pm |\mu|$

Einstein - de Haas (1915)

určení gyromagnetického poměru

$$N \cdot \vec{j} + \vec{L} = 0$$

⇔ zachování úhlového momentu

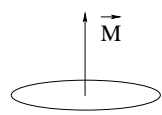
N ... počet \bar{e}

\vec{j} ... elementární úhlový moment \bar{e}

$$\begin{aligned} \vec{M} &= N \cdot \vec{M}_e = N \cdot g \cdot \left(\frac{e}{2m} \right) \cdot \vec{j} = g \frac{e}{2m} \vec{L} = \\ &= g \left(\frac{-e\hbar}{2m} \right) \frac{\vec{L}}{\hbar} = g \cdot \mu_B \frac{\vec{L}}{\hbar} \end{aligned}$$

\vec{M} , \vec{L} jsou měřitelné veličiny

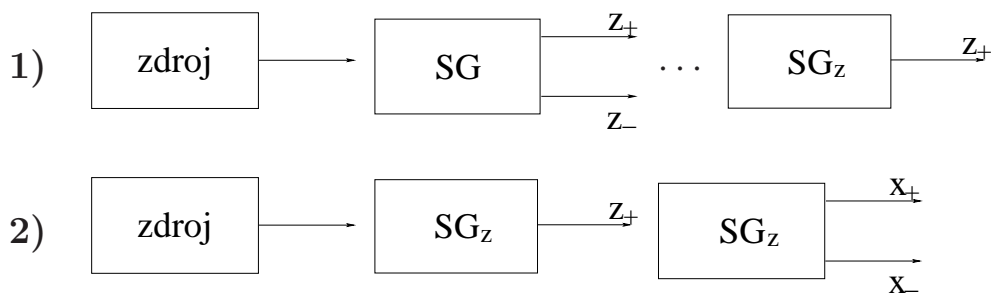
$J \cdot s = kg \, m \, s^{-2} \, m \, s = kg \frac{m^2}{s}$, což rozměrově odpovídá veličině $p \times r$

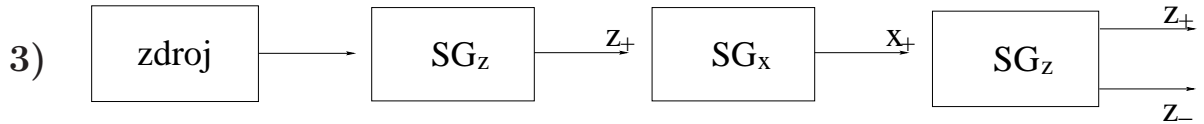


$$\vec{M} = \frac{1}{2} \int \vec{r} \times \vec{j} \, dV = \frac{1}{2} (\vec{r} \times \vec{I}) = \frac{1}{2} \frac{q}{m} (\vec{r} \times \vec{p}) = g\mu\vec{L}$$

elektron: $g = 2$... tzv. **anomální** gyromagnetický faktor

Sekvenční SG analýza:





Nemožnost současné detekce x, y, z

Srovnej $\vec{L} = J \cdot \vec{\omega}$

Polarizace světla:

$S_{z\pm}$... x, y polarizace

$$\vec{E}_x = E_0 \vec{x} \cos \phi$$

$$\vec{E}_y = E_0 \vec{y} \cos \phi$$

$$\phi = \omega t - \vec{k}\vec{r}$$

$S_{x\pm}$

$$E_{x'} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\vec{x} \cos \phi + \vec{y} \cos \phi)$$

$$E_{y'} = \frac{1}{\sqrt{2}} (-\vec{x} \cos \phi + \vec{y} \cos \phi)$$

$$|S_{x\pm}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|S_{z+}\rangle \pm |S_{z-}\rangle)$$

$$|S_{y\pm}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|S_{z+}\rangle \pm i|S_{z-}\rangle)$$

Kvantová teorie

- Stav = kompletní znalost systému
- Lineární vektorový komplexní prostor

$$a|\alpha\rangle + b|\beta\rangle = c|\gamma\rangle \quad , \quad \mathbf{0} \dots \text{nulový vektor}$$

stav je určen paprskem ve vektorovém prostoru

- duální báze

$$|\alpha\rangle \quad \dots \quad \langle\alpha| \quad (\text{sloupce vs. řádky})$$

- skalární součin

$$\langle\alpha|\beta\rangle = (\langle\beta|\alpha\rangle)^*$$

$$\left. \begin{array}{l} \langle * | \dots \text{ bra vektor} \\ | * \rangle \dots \text{ ket vektor} \end{array} \right\} \text{ Diracova notace}$$

analogie s Eukleidovským vektorovým prostorem $\vec{a} \cdot \vec{b} = \langle a|b\rangle$

- norma $\|\alpha\|^2 = \langle\alpha|\alpha\rangle \geq 0 !!$

- **operátory** \rightarrow stavu přiřazují opět stav

$$\text{lineární operátor } \mathbf{X}(a|\alpha\rangle + b|\beta\rangle) = a\mathbf{X}|\alpha\rangle + b\mathbf{X}|\beta\rangle$$

$$\text{hermitovské združení } \mathbf{X}|\alpha\rangle \rightarrow \langle\alpha|\mathbf{X}^+$$

$$\langle\beta|\mathbf{X}|\alpha\rangle = \langle\alpha|\mathbf{X}^+|\beta\rangle^* \quad \forall \alpha, \beta$$

násobení operátorů $\mathbf{XY} \neq \mathbf{YX} !$ ale $(\mathbf{XY})\mathbf{Z} = \mathbf{X}(\mathbf{YZ})$

$$(\mathbf{XY})^+ = \mathbf{Y}^+\mathbf{X}^+ \quad \text{protože } \mathbf{XY}|\alpha\rangle \rightarrow \langle\alpha|\mathbf{Y}^+\mathbf{X}^+$$

Vlastnosti skalárního součinu:

1. $\langle\varphi|(|\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle)\rangle = \langle\varphi|\psi_1\rangle + \langle\varphi|\psi_2\rangle$
2. $\langle\varphi|\alpha\psi\rangle = \alpha\langle\varphi|\psi\rangle$
3. $\langle\varphi|\psi\rangle = \langle\psi|\varphi\rangle^*$
4. $\langle\psi|\psi\rangle \geq 0$

- Vektorový prostor se skalárním součinem nazýváme **unitární prostor**.

- Prostor je **úplný**, jestliže každá Cauchyova posloupnost konverguje, tzn. tento prostor obsahuje i svoji hranici.

- **Silná konvergence:**

$$|\psi_n\rangle \longrightarrow |\psi\rangle, \text{ jestliže } \|\psi\rangle - |\psi_n\rangle\| \longrightarrow 0 \text{ pro } n \rightarrow \infty$$

- **Slabá konvergence:**

$|\psi_n\rangle$ konverguje k $|\psi\rangle$ ve slabém smyslu, jestliže

$$\forall \varphi \in \mathcal{V}; \quad \langle \varphi | (|\psi\rangle - |\psi_n\rangle) \rangle \longrightarrow 0$$

- **Hilbertův prostor** = úplný unitární prostor stavů

- **Separabilní Hilbertův prostor** = úplný unitární prostor stavů se spočetnou ortogonální bází

- **Vnější součin** $|\alpha\rangle\langle\beta|$

Zakázané výrazy: $\left. \begin{array}{l} |\alpha\rangle|\beta\rangle \\ \mathbf{X}\langle\alpha| \end{array} \right\} \text{ nedefinované !}$

Asociativní zákon: $(|\alpha\rangle\langle\beta|)|\gamma\rangle = |\alpha\rangle(\langle\beta|\gamma\rangle)$

$$\text{dále platí: } (|\alpha\rangle\langle\beta|)^+ = |\beta\rangle\langle\alpha|$$

Hermitovský operátor: $\mathbf{X} = \mathbf{X}^+$

Vlastní hodnoty hermitovského operátoru jsou reálná čísla a vlastní stavy jsou ortogonální!, neboť:

Nechť

$$\mathbf{A}|a'\rangle = a'|a'\rangle ; \langle a''|\mathbf{A}^+ = a''^*\langle a''|$$

Pak

$$\left. \begin{array}{l} \langle a''|\mathbf{A}|a'\rangle = a'\langle a''|a'\rangle \\ \stackrel{\text{proč?}}{=} a''^*\langle a''|a'\rangle \end{array} \right\} \Rightarrow (a' - a''^*)\langle a''|a'\rangle = 0$$

\implies obecně $a' - a''^* \neq 0$, pak nutně $\langle a'' | a' \rangle = 0$

Tedy $|a'_i\rangle$ tvoří úplnou ortogonální bazi,

pak pro libovolný stav (vektor) $|\alpha\rangle$ platí: $|\alpha\rangle = \sum_i c_{a'_i} |a'_i\rangle$,

$$\text{kde } c_{a'_i} = \langle a'_i | \alpha \rangle$$

Dále, necht'

$\langle \alpha | \alpha \rangle = 1$ (normalizace skalárního součinu) \longrightarrow

$$\longrightarrow \sum_i |c_{a'_i}|^2 = \sum_i \langle \alpha | a'_i \rangle \langle a'_i | \alpha \rangle =$$

$$= \langle \alpha | \sum_i (|a'_i\rangle \langle a'_i|) | \alpha \rangle = 1$$

$\implies \sum_i |a'_i\rangle \langle a'_i| = \hat{\mathbf{1}} ; \Lambda_{a'_i} = |a'_i\rangle \langle a'_i| \dots$ **projektor**

$$\implies \sum_i \Lambda_{a'_i} = \mathbf{1} ; \Lambda_{a'_i}^2 = \Lambda_{a'_i}$$

Maticová reprezentace operátorů a stavů:

$$\hat{\mathbf{X}} \equiv \sum_{i,j} |a'_j\rangle \underbrace{\langle a'_j | \hat{\mathbf{X}} | a'_i \rangle}_{\text{číslo}} \langle a'_i| ,$$

dále $|\alpha\rangle = \sum_i |a'_i\rangle \underbrace{\langle a'_i | \alpha \rangle}_{\text{číslo}}$,

vektoru $|a'_i\rangle$ odpovídá sloupec $\begin{pmatrix} a'_{i_1} \\ a'_{i_2} \\ \vdots \end{pmatrix}$

vektoru $\langle a'_i|$ odpovídá řádek $(a'_{i_1}, a'_{i_2}, \dots)$, tedy

$$|\alpha\rangle = \hat{\mathbf{X}}|\beta\rangle \iff \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \dots\dots \\ \vdots \quad \vdots \\ \dots\dots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \\ \vdots \end{pmatrix}$$

Fyzikální interpretace:

- redukce stavu do některé z hodnot spektra měřeného operátoru
- pravděpodobnostní přiřazení

$$|\alpha\rangle = \sum_i c_{a'_i} |a'_i\rangle \quad \boxed{\text{měření}} \longrightarrow |a'_i\rangle$$

$$p_{a'_i} = |\langle\alpha|a'_i\rangle|^2$$

$$\text{střední hodnota } \langle\alpha|\mathbf{A}|\alpha\rangle = \sum_i a'_i |\langle\alpha|a'_i\rangle|^2$$

měření \equiv filtrace !

Spin 1/2:

$$|S_x \pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+\rangle \pm e^{i\delta_1}|-\rangle)$$

$$|S_y \pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+\rangle \pm e^{i\delta_1}|-\rangle)$$

$$|\langle S_x | S_y \rangle|^2 \longrightarrow \frac{1}{2} |1 \pm e^{i(\delta_1 - \delta_2)}| = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

Kompatibilní měření, degenerace:

pro komutátor platí: $[\mathbf{A}, \mathbf{B}] \equiv \mathbf{AB} - \mathbf{BA} = 0$

Jestliže je spektrum \mathbf{A} nedegenerované, pak \mathbf{B} je diagonální, tedy

$$\langle a' | [\mathbf{A}, \mathbf{B}] | a'' \rangle = 0 \implies (a' - a'') \langle a' | \mathbf{B} | a'' \rangle = 0.$$

Pak $\langle a' | \mathbf{B} | a'' \rangle = 0 = b \langle a' | a'' \rangle = b \langle a'_i | a'_j \rangle = \delta_{i,j}$,

což znamená, že \mathbf{B} je diagonální (ověř dosazením!) a navíc

$$\mathbf{B} = \sum_i |a'_i\rangle \langle a'_i|$$

$|a', b', c', \dots\rangle \dots$ úplná množina pozorovatelných veličin = komutují,
sejmutí degenerace

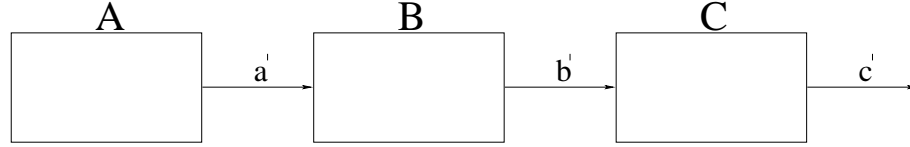
$(\mathbf{L}^2, \mathbf{L}_z) \dots$ kompatibilita \equiv neovlivňování se při měření

$\{a', b', c', \dots\} \dots$ multiindex

$$|\alpha\rangle \xrightarrow{\mathbf{A} \text{ měření}} |a'\rangle \xrightarrow{\mathbf{B}} |a', b'\rangle \xrightarrow{\mathbf{A}} \text{opět } |a'\rangle!!$$

Nekompatibilní měření:

$[\mathbf{A}, \mathbf{B}] \neq 0 \quad \dots$ neexistuje kompletní množina vlastních stavů a', b'



$$p_{a',c'} = |\langle a'|c' \rangle|^2 = \left| \sum_i \langle a'|b'_i \rangle \langle b'_i|c' \rangle \right|^2$$

$$\tilde{p}_{a',c'} = \sum_i |\langle a'|b'_i \rangle|^2 |\langle b'_i|c' \rangle|^2$$

$p_{a',c'} \neq \tilde{p}_{a',c'}$ pokud $[\mathbf{A}, \mathbf{B}] \neq 0$ nebo $[\mathbf{B}, \mathbf{C}] \neq 0$

nekompatibilita \implies relace neurčitosti:

$$\Delta \mathbf{A} = \mathbf{A} - \langle \mathbf{A} \rangle ; (\Delta \mathbf{A})^2 = \langle \mathbf{A}^2 \rangle - \langle \mathbf{A} \rangle^2.$$

Pokud jsou (\mathbf{A}, \mathbf{B}) hermitovské, pak

$$(\Delta \mathbf{A})^2 (\Delta \mathbf{B})^2 \geq \frac{1}{4} |[\mathbf{A}, \mathbf{B}]|^2$$

Důkaz:

\longrightarrow Schwartzova nerovnost

$$\langle \alpha | \alpha \rangle \langle \beta | \beta \rangle \geq |\langle \alpha | \beta \rangle|^2 ,$$

protože

$$(\langle \alpha | + \lambda^* \langle \beta |)(|\alpha \rangle + \lambda |\beta \rangle) \geq 0$$

pro $\lambda = -\frac{\langle \beta | \alpha \rangle}{\langle \beta | \beta \rangle} ,$

pak

$$|\alpha \rangle = \Delta \mathbf{A} |* \rangle ; |\beta \rangle = \Delta \mathbf{B} |* \rangle$$

$$(\Delta \mathbf{A})^2 (\Delta \mathbf{B})^2 \geq |\langle \Delta \mathbf{A} \cdot \Delta \mathbf{B} \rangle|^2 ,$$

$$\Delta\mathbf{A} \cdot \Delta\mathbf{B} = \frac{1}{2} [\Delta\mathbf{A}, \Delta\mathbf{B}] + \frac{1}{2} \{\Delta\mathbf{A}, \Delta\mathbf{B}\},$$

kde $[\ast, \ast]$... komutátor

$\{\mathbf{A}, \mathbf{B}\} = \mathbf{AB} + \mathbf{BA}$... antikomutátor

a

$$|\langle \Delta\mathbf{A} \cdot \Delta\mathbf{B} \rangle|^2 = \frac{1}{4} |\langle [\mathbf{A}, \mathbf{B}] \rangle|^2 + \frac{1}{4} |\langle \{\Delta\mathbf{A}, \Delta\mathbf{B}\} \rangle|^2.$$

Reprezentace - změna baze:

Pokud $|a_i\rangle, |b_i\rangle$ jsou dvě úplné ortogonální baze, kde $|b_i\rangle = \mathbf{U}|a_i\rangle$ pak \mathbf{U} je unitární

Unitarita: $\mathbf{U}^+\mathbf{U} = \mathbf{UU}^+ = \mathbf{1}$,
pak $\mathbf{U}^+ = \mathbf{U}^{-1}$

Důkaz:

$$\mathbf{U} = \sum_i |b_i\rangle \langle a_i|$$

$$\mathbf{U}|a_j\rangle = |b_j\rangle \quad \text{a} \quad \mathbf{U}^+\mathbf{U} = \mathbf{UU}^+ = \mathbf{1}$$

Maticová reprezentace \mathbf{U} :

$$\langle a_i | \mathbf{U} | a_j \rangle = \langle a_i | b_j \rangle$$

$$\langle b_i | \alpha \rangle = \sum_j \langle a_i | \mathbf{U}^+ | a_j \rangle \langle a_j | \alpha \rangle$$

Stopa: $\text{Tr}(\mathbf{X}) = \sum_i \langle a'_i | \mathbf{X} | a'_i \rangle$

Nechť $\mathbf{X} = \mathbf{U}^+\mathbf{X}\mathbf{U}$, pak

$$\text{Tr}(\mathbf{X}) = \text{Tr}(\mathbf{X}')$$

Diagonalizace operátoru:

$$\mathbf{B}|b'\rangle = b'|b'\rangle$$
$$\det(\mathbf{B} - \lambda\mathbf{E}) = 0$$

$\mathbf{U}\mathbf{A}\mathbf{U}^{-1}$ má stejné vlastnosti jako \mathbf{A} .

Lekce 3: Operátory se spojitým spektrem, vlnová reprezentace

Operátory polohy a impulsu

$$\xi|\xi'\rangle = \xi'|\xi'\rangle; \quad \xi \dots \text{operátor}, \quad \xi' \dots \text{komplexní číslo}$$

pak

$$\underbrace{\langle a_i | a_j \rangle = \delta_{i,j}}_{\text{diskrétní spektrum}} \quad \longrightarrow \quad \underbrace{\langle \xi'_i | \xi'_j \rangle = \delta(\xi'_i - \xi'_j)}_{\text{spojité spektrum}}$$

analogicky,

$$\begin{aligned} \sum_i |a'_i\rangle\langle a'_i| &= 1 & \longrightarrow & \int d\xi' |\xi'\rangle\langle\xi'| = 1 \\ |\alpha\rangle = \sum_i |a'_i\rangle\langle a'_i|\alpha\rangle & & \longrightarrow & |\alpha\rangle = \int d\xi' |\xi'\rangle\langle\xi'|\alpha\rangle \\ \sum_i |\langle a'_i|\alpha\rangle|^2 &= 1 & \longrightarrow & \int d\xi' |\langle\xi'|\alpha\rangle|^2 = 1 \\ \langle a'_j|\mathbf{A}|a'_i\rangle &= a'_i \delta_{i,j} & \longrightarrow & \langle \xi'_j|\xi|\xi'_i\rangle = \xi'_i \delta(\xi'_i - \xi'_j) \end{aligned}$$

Pod operátorem ξ si představme operátory souřadnice nebo hybnosti.
Tedy

$$|\alpha\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx' |x'\rangle\langle x'|\alpha\rangle \xrightarrow{\text{měření}} \int_{x'-\Delta/2}^{x'+\Delta/2} dx' |x'\rangle\langle x'|\alpha\rangle$$

Δ ... interval, který určuje přesnost měření

normalizace: $\int_{-\infty}^{+\infty} dx' |\langle x'|\alpha\rangle|^2 = 1$... částice určitě někde v prostoru
je!

3D zobecnění: $x \longrightarrow \vec{x}(x, y, z)$

$$[x_i, x_j] = 0, \quad \text{kde } i \neq j, \quad i, j \in \{1, 2, 3\}$$

Translace = posun v prostoru:

$\mathbf{T}(\Delta x') |x'\rangle = |x' + \Delta x'\rangle$; $|x'\rangle$ není vlastní stav operátoru \mathbf{T}

$$\begin{aligned} |\alpha\rangle \longrightarrow \mathbf{T}(\Delta x') |\alpha\rangle &= \int dx' |x' + \Delta x'\rangle \langle x'|\alpha\rangle = \\ &= \int dx' |x''\rangle \langle x'' - \Delta x'|\alpha\rangle \end{aligned}$$

Vlastnosti operátoru translace:

1. $\langle \alpha|\alpha\rangle = 1 \longrightarrow \langle \alpha|\mathbf{T}\mathbf{T}^+\alpha\rangle \Rightarrow \mathbf{T}\mathbf{T}^+ = 1$ (unitarita)
2. $\mathbf{T}(\Delta x'') \mathbf{T}(\Delta x') = \mathbf{T}(\Delta x' + \Delta x'')$ (skládání)
3. $\mathbf{T}(-\Delta x') = \mathbf{T}^{-1}(\Delta x')$ (inverze)
4. $\lim_{\Delta x \rightarrow 0} \mathbf{T}(\Delta x) = 1$ (neutrální prvek)

\Rightarrow translace tvoří **grupu**

Infinitezimální reprezentace grupy:

$$\mathbf{T}(\Delta x') = \mathbf{1} - i\Delta x' \mathbf{K}; \quad \mathbf{K} \dots \text{hermitovský operátor}$$

\longrightarrow splňuje čtyři grupové vlastnosti translace

$$\begin{aligned} \mathbf{x}\mathbf{T}(\Delta x')|x'\rangle &= \mathbf{x}|x' + \Delta x'\rangle = (x' + \Delta x')|x' + \Delta x'\rangle \\ \mathbf{T}\mathbf{x}|x'\rangle &= x'\mathbf{T}|x'\rangle = x'|x' + \Delta x'\rangle \end{aligned}$$

$$\Rightarrow [\mathbf{x}, \mathbf{T}]|x'\rangle = \Delta x'|x' + \Delta x'\rangle = \Delta x'|x''\rangle$$

$$\Rightarrow [\mathbf{x}, \mathbf{T}] = \Delta x' \Rightarrow [\mathbf{x}_i, \mathbf{K}_i] = i\delta_{ij}, \text{ kde} \\ \mathbf{K} = (\mathbf{K}_1, \mathbf{K}_2, \mathbf{K}_3) \text{ a } \mathbf{x} = \vec{\mathbf{x}} = (\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3)$$

pak je součin $\Delta x' \mathbf{K}$ bezrozměrný a nechť $\mathbf{K} = \frac{\mathbf{p}}{\text{konst}}$, kde

$$\mathbf{p} = \vec{\mathbf{p}} = (\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_3),$$

$$\text{tedy } \mathbf{T}(\Delta \vec{x}') = \mathbf{1} - i \frac{\Delta \vec{x}' \mathbf{p}}{\hbar} \quad \left(\text{analogie } \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{p}{\hbar} \right)$$

$$\Rightarrow [\mathbf{x}_i, \mathbf{p}_j] = i\hbar\delta_{ij}.$$

Heisenbergova relace neurčitosti:

$$\langle (\Delta \mathbf{x})^2 \rangle \langle (\Delta \mathbf{p})^2 \rangle \geq \frac{\hbar^2}{4}$$

Konečná translace:

$\mathbf{T}(\vec{x}')|\vec{x}''\rangle = |\vec{x}' + \vec{x}''\rangle$ neboli konečnou translaci lze složit z nekonečně mnoha infinitezimálních translaci, t.j.

$$\mathbf{T}(\vec{x}') = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\mathbf{1} - i \frac{\vec{x}' \mathbf{p}}{N\hbar} \right)^N = \exp \left(-i \frac{\vec{x}' \mathbf{p}}{\hbar} \right)$$

dále platí, že

$$[\mathbf{p}, \mathbf{T}(\Delta \vec{x}')] = 0, \quad \mathbf{T} \text{ je unitární, } \mathbf{T}(\Delta \vec{x}')|p\rangle = \left(\mathbf{1} - i \frac{\Delta \vec{x}' \mathbf{p}}{\hbar} \right) |p\rangle$$

Kanonické komutační relace:

$$[\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j] = 0, \quad [\mathbf{p}_i, \mathbf{p}_j] = 0, \quad [\mathbf{x}_i, \mathbf{p}_j] = i\hbar\delta_{ij}$$

Kvantování: (zavedl Dirac, 1925)

přechod od $\{ , \}_{klas}$ \longrightarrow $\frac{[,]}{i\hbar}$, kde
 $\{ , \}_{klas}$... Poissonovy závorky

např.:

$$\{A(p, q), B(p, q)\}_{klas} = \frac{\partial A}{\partial p} \frac{\partial B}{\partial q} - \frac{\partial A}{\partial q} \frac{\partial B}{\partial p} \quad \text{nebo} \quad \{x_i, p_j\}_{klas} = \delta_{ij}$$

a platí:

$$\{A, \{B, C\}\} + \{B, \{C, A\}\} + \{C, \{A, B\}\} = 0 \quad (\text{Jacobiho identita})$$

Klasické zavedení:

$$\text{Lagrange - Eulerova rovnice} \longrightarrow \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} - \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0, \quad \text{kde } L = L(q, \dot{q})$$
$$\text{a } \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = p_i.$$

$$\text{Transformace } L(q, \dot{q}) \longrightarrow H(q, p),$$

$$\text{kde } H = \sum_i p_i \dot{q}_i - L \quad (\text{Hamiltonian})$$

$$\text{a } \dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}, \quad \frac{dA}{dt} = \{A, H\}$$

Vlnová funkce a vlnová mechanika:

\longrightarrow x, p – reprezentace kvantové mechaniky

$$\langle x' | \alpha \rangle = \psi_\alpha(x'), \quad \text{pak}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_\alpha(x')|^2 dx' \longrightarrow \psi_\alpha(x') \in L^2_{(-\infty, +\infty)}$$

$$\langle \beta | \alpha \rangle = \int dx' \psi_{\beta}^*(x') \psi_{\alpha}(x').$$

Platí

$$\langle \beta | f(x') | \alpha \rangle = \int dx' \psi_{\beta}^*(x') f(x') \psi_{\alpha}(x')$$

Operátor p v x – bazi (reprezentaci)

$$\begin{aligned} \left(\mathbf{1} - \frac{i\mathbf{p}\Delta x'}{\hbar} \right) | \alpha \rangle &= \int dx' \mathbf{T}(\Delta x') | x' \rangle \langle x' | \alpha \rangle = \\ &= \int dx' | x' + \Delta x' \rangle \langle x' | \alpha \rangle = \int dx' | x'' \rangle \langle x'' - \Delta x' | \alpha \rangle \approx \\ &\approx \int dx' | x'' \rangle \left(\langle x'' | \alpha \rangle + \Delta x' \frac{\partial}{\partial x''} \langle x'' | \alpha \rangle \right) \end{aligned}$$

Srovnáním obou stran dostaneme:

$$\mathbf{p} | \alpha \rangle = \int dx' | x'' \rangle \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x''} \langle x'' | \alpha \rangle \right)$$

\Rightarrow

$$\begin{aligned} \langle x' | \mathbf{p} | \alpha \rangle &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial x'} \langle x' | \alpha \rangle \\ \langle x' | \mathbf{p} | x'' \rangle &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial x'} \delta(x' - x'') \\ \langle x' | \mathbf{p}^n | x'' \rangle &= (-i\hbar)^n \frac{\partial^{(n)}}{\partial x'^n} \delta(x' - x''). \end{aligned}$$

p – reprezentace:

$$\langle p' | \alpha \rangle = \Phi_{\alpha}(p'), \quad \text{atd.}$$

Přechod:

$$\langle x' | \mathbf{p} | p' \rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x'} \langle x' | p' \rangle = p' \langle x' | p' \rangle,$$

což je diferenciální rovnice.

$$\Rightarrow \langle x' | p' \rangle = N \cdot \exp\left(\frac{ip'x'}{\hbar}\right), \quad \text{kde } N = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}.$$

Gaussovský balík (vlnové klubko):

→ v podstatě kopíruje statistiku Gaussova rozdělení:

$$\langle x'|p' \rangle = \frac{1}{\pi^{3/4} \sqrt{d}} \exp \left(ikx' - \frac{x'^2}{2d^2} \right)$$

$$\implies \langle \mathbf{x} \rangle = 0, \quad \langle \mathbf{x}^2 \rangle = \frac{d^2}{2} = \langle (\Delta \mathbf{x})^2 \rangle$$

$$\text{a} \quad \langle \mathbf{p} \rangle = \hbar k, \quad \langle (\mathbf{p})^2 \rangle = \frac{\hbar^2}{2d^2} + \hbar^2 k^2$$

$$\implies (\Delta \mathbf{p})^2 (\Delta \mathbf{x})^2 = \frac{\hbar^2}{4} !$$

3D:

$$\mathbf{x}, \mathbf{p} \rightarrow \vec{\mathbf{x}}, \vec{\mathbf{p}}$$

$$\vec{\mathbf{p}} = -i\hbar \nabla = -i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right)$$

Lekce 4: Dynamika kvantových systémů

$|\alpha, t_0; t\rangle$ $t > t_0$ (čas nemůže běžet pozpátku) ... popisuje časový vývoj

$$\lim_{t \rightarrow t_0} |\alpha, t_0; t\rangle = |\alpha\rangle$$

a platí

$$|\alpha, t_0; t\rangle = \mathbf{U}(t, t_0) |\alpha, t_0\rangle, \text{ kde}$$

\mathbf{U} ... operátor časového vývoje čili **evoluční operátor**.

V libovolné bazi pak platí:

$$|\alpha, t_0\rangle = \sum_i c_i(t_0) |a'_i\rangle, \quad |\alpha, t_0; t\rangle = \sum_i c_i(t) |a'_i\rangle.$$

Časový vývoj má za následek, že $|c_i(t_0)| \neq |c_i(t)|$, ale

$$\sum_i |c_i(t_0)|^2 = \sum_i |c_i(t)|^2.$$

Dále platí:

$$1. \quad \langle \alpha, t_0 | \alpha, t_0 \rangle = 1 \quad \longrightarrow \quad \langle \alpha, t_0 | \alpha, t_0 \rangle = 1, \\ \mathbf{U}^\dagger(t_0, t) \mathbf{U}(t_0, t) = 1 \quad \dots \quad \text{unitarita}$$

2. skládání

$$\mathbf{U}(t_2, t_0) = \mathbf{U}(t_2, t_1) \mathbf{U}(t_1, t_0); \quad t_2 > t_1 > t_0$$

$$3. \quad \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \mathbf{U}(t_0 + \Delta t, t_0) = 1$$

Infinitezimální transformace:

$U(t_0 + dt, t_0) = \mathbf{1} - i \mathbf{\Omega} dt$, kde $\mathbf{\Omega}^\dagger = \mathbf{\Omega}$... hermitovský operátor
Nechť dále platí:

$$\mathbf{\Omega} = \frac{\mathbf{H}}{\hbar} \quad (\text{analogie s } E = \hbar\omega), \text{ kde } \mathbf{H} \dots \text{ Hamiltonián}$$

Pak

$$U(t + dt, t_0) = U(t + dt, t)U(t, t_0) = \left(\mathbf{1} - i \frac{\mathbf{H}}{\hbar} dt \right) U(t, t_0)$$

$$\iff \underbrace{U(t + dt, t_0) - U(t, t_0)}_{\frac{\partial}{\partial t} U(t, t_0) dt} = -i \frac{\mathbf{H} dt}{\hbar} U(t, t_0)$$

$$\iff i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t, t_0) = \mathbf{H} U(t, t_0)$$

$$\implies i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\alpha, t_0; t\rangle = \mathbf{H} |\alpha, t_0; t\rangle, \text{ což je}$$

Schrödingerova rovnice pro časový vývoj.

Řešení:

1. \mathbf{H} nezávisí na čase

$$U(t, t_0) = \exp\left(-i \frac{\mathbf{H}}{\hbar} (t - t_0)\right)$$

2. \mathbf{H} závisí na čase, ale $[\mathbf{H}(t), \mathbf{H}(t')] = 0 \quad \forall t, t'$

$$U(t, t_0) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \mathbf{H}(t') dt'\right)$$

3. \mathbf{H} závisí na čase a v různých časech tento operátor nekomutuje !

$$\mathbf{U}(t, t_0) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \left(-\frac{i}{\hbar} \right)^n \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n \mathbf{H}(t_1) \cdot \mathbf{H}(t_2) \cdot \dots \cdot \mathbf{H}(t_n)$$

tzv. Dysonova řada

Časová změna baze:

$$[\mathbf{A}, \mathbf{H}] = 0,$$

$$\mathbf{H}|a'_j\rangle = E_j|a'_j\rangle,$$

pak

$$\begin{aligned} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \mathbf{H}t\right) &= \sum_j \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \mathbf{H}t\right) |a'_j\rangle\langle a'_j| = \\ &= \sum_j |a'_j\rangle\langle a'_j| \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_j t\right). \end{aligned}$$

Dále, pokud chceme vyjádřit časovou závislost nějakého stavu $|\alpha, t_0; t\rangle$, platí

$$|\alpha, t_0; t\rangle = \sum_j |a'_j\rangle\langle a'_j|\alpha, t_0\rangle \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_j t\right),$$

$$c_i(t=0) \longrightarrow c_j(t) = c_j(t=0) \cdot \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_j t\right),$$

speciálně pro stav $|a'_j\rangle$ odvodíme

$$|a'_j, t_0\rangle \longrightarrow |a'_j, t_0\rangle \cdot \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_j t\right) = |a'_j, t\rangle.$$

Můžeme sestavit množinu všech vzájemně kompatibilních operátorů komutujících s \mathbf{H} . Necht' \mathbf{A}, \mathbf{B} jsou některé z nich, pak střední hodnota operátoru $\langle \mathbf{B} \rangle$ stacionárních stavů nezávisí na čase.

V opačném případě, u nestacionárních stavů, tato střední hodnota už na

čase záviset bude, konkrétně takto:

$$\langle \mathbf{B} \rangle = \sum_{j,k} c_j^* c_k \langle a'_j | \mathbf{B} | a'_k \rangle \exp \left(-\frac{i}{\hbar} (E_j - E_k) t \right)$$

Příklad časového vývoje:

→ precese spinu

Uvažujme magnetické pole a necht' pro vektor magnetické indukce platí:
 $\vec{B} = (0, 0, B)$.

Pak

$$H = - \left(\frac{e}{m_e} \right) \cdot \vec{\mathbf{S}} \cdot \vec{B}, \text{ kde}$$

$\vec{\mathbf{S}} = (\mathbf{S}_x, \mathbf{S}_y, \mathbf{S}_z)$... vektorový spinový operátor
 tedy

$$H = -\frac{e}{m_e} B \cdot \mathbf{S}_z, \quad e < 0; \quad \mathbf{S}_z = \frac{1}{2} \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Jelikož $[\mathbf{H}, \mathbf{S}_z] = 0$, $\Rightarrow |+\rangle, |-\rangle$ jsou vlastní stavy s energií $\mp \frac{eB\hbar}{2m_e}$.

Definujme dále $\omega = \frac{|e|B}{m_e}$, pak

$$\mathbf{H} = \omega \cdot \mathbf{S}_z \quad \text{a} \quad \mathbf{U} = \exp \left(-\frac{i\omega \mathbf{S}_z}{\hbar} t \right)$$

Pro libovolný stacionární spinový stav platí

$$|\alpha\rangle = c_+ |+\rangle + c_- |-\rangle \quad \longrightarrow$$

$$|\alpha, t\rangle = c_+ \exp \left(-\frac{i\omega t}{\hbar} \right) |+\rangle + c_- \exp \left(-\frac{i\omega t}{\hbar} \right) |-\rangle.$$

Např.:

necht' $c_+ = c_- = \frac{1}{\sqrt{2}}$ a necht' se pozorování uskutečňuje ve smeru osy x ,
 pak

$$|\langle \mathbf{S}_{x^\pm} | \alpha, t \rangle|^2 = \begin{cases} \cos^2 \frac{\omega t}{2} & \text{ve směru } x^+ \\ \sin^2 \frac{\omega t}{2} & \text{ve směru } x^- \end{cases},$$

tedy

$$\langle \mathbf{S}_x \rangle = \frac{\hbar}{2} \cos \omega t, \quad \langle \mathbf{S}_y \rangle = \frac{\hbar}{2} \sin \omega t, \quad \langle \mathbf{S}_z \rangle = 0,$$

což je precese spinu.

Relace neurčitosti pro energii a čas:

Korelační amplituda

$$c(t) = \langle \alpha | \alpha, t_0; t \rangle = \langle \alpha | \mathbf{U}(\mathbf{t}_0, \mathbf{t}) | \alpha \rangle.$$

Rozvoj do vlastních stavů energie:

$$c(t) = \sum_j |c_j|^2 \cdot \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_j t\right).$$

Přechod ke spojitému spektru:

$$\begin{aligned} \sum_j &\longrightarrow \int dE \rho(E), & \text{kde } \rho(E) \dots \text{ hustota energetických stavů.} \\ c_j &\longrightarrow g(E) \end{aligned}$$

$$\implies c(t) = \int dE \rho(E) \cdot |g(E)|^2 \exp\left(-\frac{i}{\hbar} Et\right).$$

Normalizace: $\int dE \rho(E) \cdot |g(E)|^2 = 1.$

Dále

$$c(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_0 t\right) \cdot \int dE \rho(E) \cdot |g(E)|^2 \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \Delta E t\right)$$

pak $c(t) \neq 0 \forall t$ a $\Delta E \cdot t \equiv \hbar!$

Schrödingerova vs. Heisenbergova reprezentace:

→ přechod k nestacionárním stavům

$$|\alpha\rangle \rightarrow \mathbf{U}|\alpha\rangle; |\beta\rangle = \mathbf{U}|\beta\rangle,$$

pak

$$\begin{aligned} \langle\beta|\alpha\rangle &\longrightarrow \langle\beta|\mathbf{U}^+\mathbf{U}|\alpha\rangle \equiv \langle\beta|\alpha\rangle \quad \text{a} \\ \langle\beta|\mathbf{X}|\alpha\rangle &\longrightarrow \langle\beta|\mathbf{U}^+\mathbf{X}\mathbf{U}|\alpha\rangle \equiv \langle\beta|\mathbf{U}^+\mathbf{X}\mathbf{U}|\alpha\rangle. \end{aligned}$$

1. $|\alpha\rangle \rightarrow \mathbf{U}|\alpha\rangle$ a nemění se operátory
2. $\mathbf{X} \rightarrow \mathbf{U}^+\mathbf{X}\mathbf{U}$ a nemění se stavy

Př.:

translace

$$1. |\alpha\rangle \rightarrow \left(\mathbf{1} - i \frac{d\vec{x}\vec{p}}{\hbar} \right) |\alpha\rangle, \text{ ale}$$

$$\mathbf{x} = \mathbf{x}$$

$$2. |\alpha\rangle \rightarrow |\alpha\rangle, \text{ ale}$$

$$\mathbf{x} \rightarrow \left(\mathbf{1} + i \frac{d\vec{x}\vec{p}}{\hbar} \right) \mathbf{x} \left(\mathbf{1} - i \frac{d\vec{x}\vec{p}}{\hbar} \right) = \vec{x} + d\vec{x}$$

1. \equiv Schrödingerův obraz (pro časový vývoj)
2. \equiv Heisenbergův obraz

Platí:

$$\mathbf{A}^H(0) = \mathbf{A}^S, \quad |\alpha, t\rangle_H = |\alpha, t_0\rangle_S$$

Heisenbergovy pohybové zákony:

Nechť $\mathbf{A}^S \neq \mathbf{A}^S(t)$

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{A}^H}{dt} &= \frac{\partial}{\partial t}(\mathbf{U}^+ \mathbf{A}^S \mathbf{U}) = \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{U}^+ \cdot \mathbf{A}^S \mathbf{U} + \mathbf{U}^+ \mathbf{A}^S \cdot \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{U} = \\ &\text{dosad' = Sch.r. } \frac{1}{i\hbar} [\mathbf{A}^H, \mathbf{H}] ; \text{ použito } \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{U} = \frac{1}{i\hbar} \mathbf{H} \mathbf{U}. \end{aligned}$$

Souvisí s klasickými pohybovými zákony.

$$\longrightarrow \frac{dA}{dt} = [A, H]_{\text{Pois}} ! \quad \text{formální kvantování}$$

Ehrestův teorém: (1927)

→ klasické pohybové zákony obdržíme jako vývoj středních hodnot!

Volná částice:

$$[\mathbf{x}_j, \mathbf{F}(p)] = i\hbar \frac{\partial F}{\partial p_j}$$

$$[\mathbf{p}_k, \mathbf{G}(x)] = -i\hbar \frac{\partial G}{\partial x_k}$$

Pak

$$\mathbf{H} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}$$

$$\frac{d\mathbf{x}_j}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\mathbf{x}_j, \mathbf{H}] = \frac{\mathbf{p}_j}{m} ; \quad \mathbf{p}_j(t) = \mathbf{p}_j(0)$$

Řešení:

$$\mathbf{x}_j(t) = \mathbf{x}_j(0) + \frac{\mathbf{p}_j(0)}{m} t$$

$$\longrightarrow [\mathbf{x}_j(t), \mathbf{x}_j(0)] = \left[\frac{\mathbf{p}_j(0)}{m} t, \mathbf{x}_j \right] = -\frac{i\hbar t}{m}$$

$$\implies (\Delta \mathbf{x}_j(t))^2 (\Delta \mathbf{x}_j) \geq \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2} !!$$

$$\Delta x_{\text{SQ}} \sim \sqrt{\frac{\hbar\tau}{m}} \quad \dots \quad \text{standardní kvantová limita}$$

pohyb částice v potenciálovém poli:

$$\mathbf{H} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \mathbf{V}(x)$$

$$\frac{d\mathbf{p}_j}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\mathbf{p}_j, \mathbf{H}] = -\frac{\partial}{\partial x} \mathbf{V}(x)$$

$$\frac{d\mathbf{x}_j}{dt} = \frac{d\mathbf{p}_j}{m} \quad \longrightarrow \quad \frac{d^2\mathbf{x}_j}{dt^2} = \frac{1}{i\hbar} \left[\frac{d\mathbf{x}_j}{dt}, \mathbf{H} \right] = \frac{1}{m} \frac{d\mathbf{p}_j}{dt}$$

$$\iff m \frac{d^2x}{dt^2} = - \text{grad } \mathbf{V}(x)$$

$$\longrightarrow m \left\langle \frac{d^2x}{dt^2} \right\rangle = - \langle \nabla \mathbf{V}(x) \rangle \quad \dots \quad \text{Newtonův zákon}$$

Matice hustoty:

$|\alpha\rangle = c_+|+\rangle + c_-|-\rangle \quad \dots \quad$ čistý stav, principiálně neurčitelný

\longrightarrow studujme náhodný stav (viz analogie: polarizovaný vs. nepolarizovaný stav)

\Rightarrow **středování** přes náhodné soubory

$$[\mathbf{A}] = \sum_i w_i \langle \alpha_i | \mathbf{A} | \alpha_i \rangle ,$$

tj. s pravděpodobnostmi w_i nalézáme stav $|\alpha_i\rangle$.

$$[\mathbf{A}] = \sum_{i,j} a_j w_i |\langle \alpha_i | a_j \rangle|^2 \quad \text{vyjádřeno v diagonální bazi } |a_j\rangle$$

$$\iff \sum_{r,s} \sum_i w_i \langle \beta_r | \mathbf{A} | \beta_s \rangle \langle \beta_s | \alpha_i \rangle \langle \alpha_i | \beta_r \rangle$$

Matice hustoty $\longrightarrow \rho = \sum_i w_i |\alpha_i\rangle \langle \alpha_i|$

$$[\mathbf{A}] = \text{Tr}(\rho \mathbf{A}) !!$$

$$\text{Tr}(\rho) = \sum_i w_i \langle \alpha_i | \alpha_i \rangle = \sum_i w_i = 1 .$$

Pro čistý stav $|\alpha_i\rangle \langle \alpha_i|$ platí:

$$\rho^2 = \rho, \quad \text{Tr}(\rho^2) = 1; \quad \text{jinak je } \text{Tr}(\rho^2) \leq 1$$

Časový vývoj statistického souboru

$$\rho(t_0) = \sum_i w_i |\alpha_i\rangle \langle \alpha_i|.$$

Přechod $|\alpha_i\rangle = |\alpha_i, t\rangle$

$$\implies i\hbar \frac{\partial \rho}{\partial t} = \sum_j w_j (\mathbf{H} |\alpha_j, t\rangle \langle \alpha_j, t| - |\alpha_j, t\rangle \langle \alpha_j, t| \mathbf{H}) = -[\rho, \mathbf{H}]$$

$$\iff \frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{1}{i\hbar} [\rho, \mathbf{H}] \quad \dots \quad \text{Liouvillova rovnice kontinuity ve fázovém prostoru}$$

Vlastnosti ρ :

$$\text{Tr}(\rho) = 1; \quad \rho \geq 0,$$

v diagonální bazi lze psát $\rho = \sum_i \lambda_i |\lambda_i\rangle \langle \lambda_i|$,

kde $\lambda_i \geq 0$ jsou vlastní hodnoty odpovídající ortogonálním stavům $|\lambda_i\rangle$.

Ve statistické fyzice matice hustoty definuje entropii $\sigma = -\text{Tr}(\rho \ln \rho)$.

Lekce 5: Řešení Schrödingerovy rovnice

Harmonický oscilátor

$$\mathbf{H} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega \mathbf{x}^2, \text{ kde } \omega = \frac{k}{m}$$

Řešení:

zavedeme substituci;

$$\mathbf{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(\mathbf{x} + i \frac{\mathbf{p}}{m\omega} \right), \quad \mathbf{a}^+ = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(\mathbf{x} - i \frac{\mathbf{p}}{m\omega} \right),$$

kde

$$\begin{aligned} \mathbf{a}^\dagger & \dots \text{ kreační operátor} \\ \mathbf{a} & \dots \text{ anihilační operátor} \end{aligned} \quad \mathbf{a} [\mathbf{a}, \mathbf{a}^+] = 1.$$

Pak

$$\mathbf{a}^+ \mathbf{a} = \frac{\mathbf{H}}{\hbar\omega} - \frac{1}{2}; \quad \mathbf{N} = \mathbf{a}^+ \mathbf{a} \dots \text{ operátor počtu částic}$$

Baze:

$$\mathbf{N}|n\rangle = n|n\rangle; \quad \mathbf{H}|n\rangle = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) |n\rangle$$

$$[\mathbf{N}, \mathbf{a}] = -\mathbf{a}; \quad [\mathbf{N}, \mathbf{a}^+] = \mathbf{a}^+$$

$$\Rightarrow \begin{aligned} \mathbf{N}\mathbf{a}^+|n\rangle &= (n+1)\mathbf{a}^+|n\rangle \\ \mathbf{N}\mathbf{a}|n\rangle &= (n-1)\mathbf{a}|n\rangle \end{aligned} \quad \text{tj. } \mathbf{a}^+|n\rangle \text{ je také vlastní stav } \mathbf{a}|n\rangle$$

$$\mathbf{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle, \quad \mathbf{a}^+|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle, \quad \text{kde}$$

$n \dots$ nezáporná celá čísla, $n \in \{0, 1, 2, 3, \dots\}$

$$\langle \mathbf{N} \rangle = \langle \mathbf{a}^+ \mathbf{a} \rangle \geq 0 \quad (\text{norma!})$$

$|0\rangle \dots$ základní stav (vakuum)

$$|1\rangle = \mathbf{a}^+|0\rangle, \quad |n\rangle = \frac{\mathbf{a}^{+n}}{\sqrt{n!}}|0\rangle$$

$$\langle n' | \mathbf{a} | n \rangle = \sqrt{n} \delta_{n' n-1}, \quad \langle n' | \mathbf{a}^+ | n \rangle = \sqrt{n+1} \delta_{n' n+1}$$

$$\mathbf{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\mathbf{a} + \mathbf{a}^+), \quad \mathbf{p} = i \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} (-\mathbf{a} + \mathbf{a}^+)$$

x - reprezentace:

$$\mathbf{a}|0\rangle = 0 \implies \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \langle x | \left(\mathbf{x} + \frac{i\mathbf{p}}{m\omega} \right) |0\rangle = 0$$

$$\iff \left(\mathbf{x} + x_0^2 \frac{d}{dx} \right) \langle x|0\rangle = 0, \quad x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$$

$$\implies \langle x|0\rangle = \frac{1}{\pi^{\frac{1}{4}} \sqrt{x_0}} \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{x}{x_0} \right)^2 \right]$$

dále,

$$\langle x|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{x_0} \left(\mathbf{x} - x_0^2 \frac{d}{dx} \right) \langle x|0\rangle$$

\vdots

$$\langle x|n\rangle = \frac{1}{\pi^{\frac{1}{4}} \sqrt{2^n n!}} \cdot \frac{1}{x_0^{n+\frac{1}{2}}} \left(\mathbf{x} - x_0^2 \frac{d}{dx} \right)^n \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{x}{x_0} \right)^2 \right] \langle x|0\rangle.$$

Pak

$$\left. \begin{aligned} \langle 0 | \mathbf{x}^2 | 0 \rangle &= \frac{\hbar}{2m\omega} \\ \langle 0 | \mathbf{p}^2 | 0 \rangle &= \frac{\hbar m\omega}{2} \end{aligned} \right\} \Rightarrow \Delta \mathbf{x} \Delta \mathbf{p} = \frac{\hbar}{2}.$$

Časový vývoj:

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = -m\omega^2 \mathbf{x}, \quad \frac{d\mathbf{x}}{dt} = \frac{\mathbf{p}}{m}$$

nebo také pomocí operátorů \mathbf{a}, \mathbf{a}^+

$$\frac{d\mathbf{a}}{dt} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(\frac{\mathbf{p}}{m} - i\omega \mathbf{x} \right) = -i\omega \mathbf{a}$$

$$\frac{d\mathbf{a}^+}{dt} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(\frac{\mathbf{p}}{m} + i\omega \mathbf{x} \right) = i\omega \mathbf{a}^+$$

$$\Rightarrow \mathbf{a}(t) = \mathbf{a}(0) e^{-i\omega t}, \quad \mathbf{a}^+(t) = \mathbf{a}^+(0) e^{i\omega t}$$

a také

$$\mathbf{x}(t) = \mathbf{x}(0) \cos \omega t + \frac{\mathbf{p}(0)}{m\omega} \sin \omega t$$

$$\mathbf{p}(t) = -m\omega \mathbf{x}(0) \sin \omega t + \mathbf{p}(0) \cos \omega t$$

Matematický doplněk:

Vlastní stavy harmonického oscilátoru

$$\rightarrow \Psi_n(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(\frac{m\omega}{\pi \hbar} \right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{\xi^2}{2}} H_n(\xi), \text{ kde}$$

$$\xi = \frac{x}{x_0} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x, \quad E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

a

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2} \dots \text{ Hermitovy polynomy,}$$

navíc

$$\int_{-\infty}^{+\infty} H_{n'}(\xi) H_n(\xi) d\xi e^{-\xi^2} = \pi^{\frac{1}{2}} 2^n \delta_{nn'}$$

Baker - Hausdorffova identita:

$$\begin{aligned} \exp(i\mathbf{G}\lambda) \mathbf{A} \exp(-i\mathbf{G}\lambda) &= \\ &= \mathbf{A} + i\lambda [\mathbf{G}, \mathbf{A}] + \frac{i^2\lambda^2}{2!} [\mathbf{G}, [\mathbf{G}, \mathbf{A}]] + \dots \end{aligned}$$

Schrödingerova vlnová rovnice:

$$\Psi(x', t) = \langle x' | \alpha, t_0; t \rangle$$

$$\mathbf{H} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{x}); \quad \mathbf{p}, \mathbf{x} \quad \dots \quad \text{operátory}$$

$$\langle x'' | V(\mathbf{x}) | x' \rangle = V(x') \delta(x'' - x')$$

(obecně je však $V = V(t)$ nebo v elektrodynamice je $V \sim pA + Ap$)

$$\begin{aligned} \Rightarrow \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle x' | \alpha, t_0; t \rangle &= \langle x' | \mathbf{H} | \alpha, t_0; t \rangle \\ \Leftrightarrow \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x', t) &= -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla'^2 \Psi(x', t) + V(x') \Psi(x', t) \end{aligned}$$

kde $\Psi(x', t) \in \mathcal{L}^2(-\infty, \infty)$

→ S.vl. rce - základ vlnové mechniky (Schrödinger 1926)

Časově nezávislá vlnová rovnice:

$$\langle x' | \alpha, t_0; t \rangle = \langle x' | \alpha, t_0 \rangle \exp\left(-\frac{iE_\alpha t}{\hbar}\right),$$

pak

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla'^2 u_E(x') + V(x') u_E(x') = E u_E(x')$$
$$\frac{d^2}{dx^2} \Psi(x) = f(x) \Psi(x), \quad \text{kde } f(x) = \frac{2m}{\hbar^2} (V(x) - E)$$

→ Diskrétní vs. spojité spektrum

Obecné vlastnosti stacionárních stavů v 1D

Asymptotické chování: $\frac{d^2 \Psi}{dx^2} = \Psi''(x) = f(x) \Psi(x)$

→ Předpoklad: necht' $f(x) \geq \varkappa^2$ pro $x \geq a$
kde $\varkappa, a \geq 0$... reálné konstanty

dvě nezávislá řešení: Ψ_1, Ψ_2

$$\left. \begin{array}{l} \Psi_1(a) = \Psi_2'(a) = 1 \\ \Psi_1'(a) = \Psi_2(a) = 0 \end{array} \right\} \Rightarrow \Psi_{1,2}, \Psi'_{1,2} > 0$$

Wronskián

$$W(u, v, x) = uv' - u'v,$$

pokud $u'' = f_1 u$, $v'' = f_2 v$, pak

$$\frac{d}{dx} W = (f_2 - f_1) uv, \text{ pak}$$

$$W(\Psi_1, \Psi_2, x) = 1.$$

Protože $\frac{1}{\Psi_2(x)\Psi_2'(x)} > 0$, platí

$$\varphi(x) - \rho(x) = \frac{1}{\Psi_2 \Psi_2'} > 0, \quad \text{kde } \varphi(x) = \frac{\Psi_1(x)}{\Psi_2(x)}, \quad \rho = \frac{\Psi_1'(x)}{\Psi_2'(x)}.$$

Uvažme rovnici:

$$w'' = \varkappa^2 w, \text{ pak } \begin{array}{l} w_1 = \cosh \varkappa(x - a) \\ w_2 = \sinh \varkappa(x - a) \end{array}$$

$$W(u, v, x_2) - W(u, v, x_1) = \int_{x_1}^{x_2} (f_2(x') - f_1(x')) u(x')v(x')dx' .$$

Nechť $x_1 = a, x_2 = x > a$

$$\text{a } f_1(x') = f(x), f_2(x') = \varkappa^2$$

$$\text{a } u = \Psi_1, v = \cosh \varkappa(x - a).$$

Pak

$$\begin{aligned} \Psi_1(x) \varkappa \sinh \varkappa(x - a) - \Psi_1'(x) \cosh \varkappa(x - a) &= \\ &= - \int_a^x \underbrace{(f(x') - \varkappa^2)}_{> 0} \underbrace{\Psi_1(x')}_{> 0} \underbrace{\cosh \varkappa(x - a)}_{> 0} dx' \\ \implies \frac{\Psi_1'(x)}{\Psi_1(x)} &> \varkappa \frac{\sinh \varkappa(x - a)}{\cosh \varkappa(x - a)}, \end{aligned}$$

pak po integraci a odstranění přirozeného logaritmu dostaneme:

$$\Psi_1(x) > \cosh \varkappa(x - a) !$$

Analogicky: $u = \Psi_2, v = \sinh \varkappa(x - a)$

$$\implies \frac{\Psi_2'(x)}{\Psi_2(x)} \geq \varkappa \frac{\cosh \varkappa(x - a)}{\sinh \varkappa(x - a)}$$

pak po integraci v určitých mezích obdržíme:

$$\begin{aligned} \ln \frac{\Psi_2(x)}{\Psi_2(x_1)} &\geq \ln \frac{\sinh \varkappa(x - a)}{\sinh \varkappa(x_1 - a)} \\ \iff \Psi_2(x) &\geq \frac{\Psi_2(x_1)}{\sinh \varkappa(x_1 - a)} \sinh \varkappa(x - a). \end{aligned}$$

Pokud bychom uvážili limitu $x_1 \rightarrow a$, pak hodnoty

$$\Psi_2(a) = \sinh \varkappa(0) = 0.$$

Užijeme-li L'Hospitalovo pravidlo o limitním podílu $\frac{0}{0}$, pak

$$\begin{aligned} \Psi_2(x) &\geq \frac{\Psi_2'(a)}{\varkappa \cosh \varkappa(0)} \sinh \varkappa(x_1 - a) \\ \iff \Psi_2(x) &\geq \frac{\sinh \varkappa(x - a)}{\varkappa} \end{aligned}$$

Závěr 1:

pro $x \rightarrow \infty$ Ψ_1, Ψ_2 divergují jako $\sim \exp(\varkappa x)$

Závěr 2:

existuje právě jedno lineárně nezávislé řešení, které pro $x \rightarrow \infty$ je shora omezeno funkcí $A \cdot \exp(-\varkappa x)$

Důkaz:

$$\begin{aligned} \varphi'(x) &= -\frac{W(\Psi_1, \Psi_2, x)}{\Psi_2^2(x)} = -\frac{1}{\Psi_2^2} < 0 \\ \rho'(x) &= \frac{f(x) \cdot W}{(\Psi_2')^2} \geq \frac{\varkappa^2}{(\Psi_2')^2} > 0. \end{aligned}$$

Tedy $\varphi > 0$ a klesá \Rightarrow existuje limita:

$$\lim_{x \rightarrow \infty} = \alpha > 0.$$

Protože $0 \leq \varphi - \rho = \frac{1}{\Psi_2 \Psi_2'}$ a $\Psi_2 \geq \frac{\sinh \varkappa(x - a)}{\varkappa}$

$$\implies \lim_{x \rightarrow \infty} \frac{1}{\Psi_2 \Psi_2'} \leq \lim_{x \rightarrow \infty} \frac{1}{\frac{\sinh \varkappa(x - a)}{\varkappa} \cosh \varkappa(x - a)} = 0,$$

pak v limitě $x \rightarrow \infty$, $\varphi = \rho$.

ρ stále roste $\rightarrow 0 \leq \rho(x) \leq \alpha$.

Uvažme: $\Psi_- = \Psi_1(x) - \alpha\Psi_2(x)$ **je opět řešením !!** , pak

$$\lim_{x \rightarrow \infty} = 0, \text{ protože } \varphi = \frac{\Psi_1}{\Psi_2} \longrightarrow \alpha.$$

Jelikož je $\rho \leq \alpha$, můžeme psát

$$\begin{aligned} \Psi_- &\leq \Psi_1 - \rho\Psi_2 = \frac{1}{\Psi_2'} \leq \frac{1}{\kappa\Psi_2} \frac{\sinh \kappa(x-a)}{\cosh \kappa(x-a)} \leq \\ &\leq \frac{1}{\cosh \kappa(x-a)} < 2 \exp[-\kappa(x-a)] !!, \end{aligned}$$

a také

$$\Psi_-'(x) = \Psi_1'(1 - \frac{\alpha}{\rho}) < 0 \text{ pro } x > a$$

Tedy: $\Psi_-(x)$ klesá k 0 pro $x \rightarrow \infty$,

$$0 < \Psi_-(x) < 2 \exp[-\kappa(x-a)]$$

Závěr 3:

Nechť $\Psi''_x = f(x)\Psi(x)$, $f(x) = -k^2 + \Delta(x)$, $\lim_{x \rightarrow \pm\infty} \Delta(x) = 0$;

má řešení

$$\Psi(x) \sim A \cdot \sin(kx + \omega_0) ,$$

které je normovatelné na δ - funkci.

Obecné řešení Schrödingerovy rovnice:

Nechť $V(x)$ je po částech spojitá na $(-\infty, +\infty)$ a $\lim_{x \rightarrow \pm\infty} V(x) = V_{\pm}$ (konstanty)

Nechť $V_+ \geq V_-$; $\kappa_{\pm} = \frac{\sqrt{2m(V_{\pm} - E)}}{\hbar} \geq 0$.

Pak pro $E < V_-$ existuje právě jedno řešení, které konverguje

$$\begin{aligned} \Psi^{(1)}(x) &\longrightarrow \exp(-\kappa_+x) , \quad x \longrightarrow +\infty \\ \Psi^{(2)}(x) &\longrightarrow \exp(-\kappa_-x) , \quad x \longrightarrow +\infty. \end{aligned}$$

Ostatní řešení divergují jako $\exp(+\kappa_{\pm}x)$

1. Pro $E < V_- \leq V_+$ mohou existovat pouze nede degenerované řešení třídy L^2 , tj. diskrétní spektrum (vázaný stav)
2. Pro $V_- < E \leq V_+$ a $x \rightarrow -\infty$ je řešením periodická funkce, pro $x \rightarrow +\infty$ je řešením funkce $\sim \exp(-\kappa_+ x)$ obdržíme nede degenerované vlastní hodnoty spojitého spektra.
3. Pro $x \rightarrow \pm \infty$ je řešením periodická funkce.
Řešení odpovídá 2-krát degenerovanému stavu spojité části spektra (částice se může pohybovat jak doleva tak doprava).

Souvislost s klasickým popisem:

Jestliže E patří do diskrétní části spektra, částice **může** klasicky vykonávat **pouze finitní (prostorově omezený)** pohyb.

Důsledek 1:

Nede degenerovanost diskrétního spektra \equiv vlnová funkce je reálná.

Důkaz:

$\Psi'' = f(x)\Psi$, kde Ψ je reálná funkce, pak Ψ a Ψ^* jsou řešení, tedy musí být lineárně závislé.

$\Rightarrow \Psi^* = e^{2i\gamma}\Psi$, $\Psi = \varphi + i\chi$, tedy

$$\varphi - i\chi = e^{2i\gamma}(\varphi + i\chi)$$

Důsledek 2:

Reálné řešení je konvexní (konkávní), pokud

$$f(x)\Psi > 0 \quad (f(x)\Psi < 0).$$

Oscilační věta:

Nechť diskrétní spektrum je tvořeno energiemi

$$E_1 < E_2 < \dots < E_n,$$

pak $\Psi_n(x)$ popisující stacionární řešení s energií E_n má právě $(n - 1)$ nulových bodů.

Silnější věta:

Mezi libovolnými dvěma body funkce $\Psi_n(x)$ leží právě jeden nulový bod funkce $\Psi_{n+1}(x)$

Důkaz: \rightarrow sporem

Nechť $u = \Psi_n(x)$, $v = \Psi_{n+1}(x)$, $f_2 - f_1 = E_n - E_{n+1} < 0$

$$\begin{aligned} \Psi'_n(x_1)\Psi_{n+1}(x_1) - \Psi'_n(x_2)\Psi_{n+1}(x_2) &= \\ &= (E_n - E_{n+1}) \int_{x_1}^{x_2} \Psi_n(x)\Psi_{n+1}(x) dx, \quad (*) \end{aligned}$$

kde x_1, x_2 jsou nulové body a $x_1 < x_2$.

Nechť $\Psi_n > 0$ na intervalu (x_1, x_2) , pak $\Psi'_n(x_1) \geq 0$,

$\Psi'_n(x_2) \leq 0$. Nechť $\Psi_{n+1} > 0$ na intervalu (x_1, x_2) , tj. nemá na tomto intervalu nulové body, pak z (*) plyne

$$L > 0, \quad P < 0 \quad \rightarrow \text{spor !!}$$

Interpretace vlnové funkce:

$\rho(x', t) = |\langle x' | \alpha, t_0, t \rangle|^2 \quad \dots$ hustota pravděpodobnosti

$\int \rho(x', t) d^3x' \quad \dots$ pravděpodobnost

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div} \vec{j} = 0 \quad (\text{rovnice kontinuity})$$

$$\vec{j} = -\frac{i\hbar}{2m} [\Psi^* \text{grad} \Psi - (\text{grad} \Psi^*) \Psi] = \frac{\hbar}{m} \text{Im}(\Psi^* \nabla \Psi).$$

Hermitovskost V – potenciální energie ve Sch. rci \dots důležité !!

$$\int \vec{j}(x, t) d^3x = \frac{\langle \vec{p} \rangle}{m} \quad \dots \sim \text{dynamika kapalin}$$

Historická interpretace ρ jako hustota látky. Tato představa byla neudržitelná z důvodu kolapsu vlnové funkce.

Klasický význam vlnové funkce:

$$\Psi = \sqrt{\rho} \exp\left(\frac{i}{\hbar} S(x, t)\right) \quad \dots \text{ polární rozklad}$$

$$\Psi^* \nabla \Psi = \sqrt{\rho} \nabla \sqrt{\rho} + \frac{i}{\hbar} \sqrt{\rho} \nabla S, \quad \vec{j} = \frac{\rho}{m} \nabla S$$

$$\Psi(\vec{x}, t) = \exp\left(\frac{i\vec{p}\vec{x}}{\hbar} - \frac{iEt}{\hbar}\right)$$

$$\nabla S \sim \vec{p}, \quad \frac{\nabla S}{m} \sim \vec{v}$$

$$\Rightarrow \frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div}(\rho \cdot \vec{v}) = 0$$

Klasické přiblížení: WKB řešení (Wentzel, Kramers, Brillouin)

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + V\Psi = E\Psi, \quad \Psi = \sqrt{\rho} \cdot e^{\frac{i}{\hbar}S(x,t)}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\nabla^2 \sqrt{\rho} + \frac{2i}{\hbar} \nabla \sqrt{\rho} \nabla S - \frac{1}{\hbar^2} \sqrt{\rho} |\nabla S|^2 \right) + \sqrt{\rho} V = i\hbar \left[\frac{\partial \sqrt{\rho}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} \sqrt{\rho} \frac{\partial S}{\partial t} \right]$$

\hbar malé \rightarrow aproximace $\hbar \nabla^2 S \ll |\nabla S|^2$

$$\frac{1}{2m} |\nabla S(x, t)|^2 + V(x) + \frac{\partial S}{\partial t} = 0,$$

což je Hamiltonova - Jacobiho rovnice pro akci

$$\frac{\partial S}{\partial t} + H\left(\frac{\partial S}{\partial q_i}, q_i\right) = 0$$

Stacionární řešení

$$S(x, t) = W(x) - Et, \quad \vec{p}_{\text{clas}} = \nabla \cdot w$$

analogie: geometrická optika \sim klasická mechanika

vlnová optika \sim kvantová mechanika

1 D řešení:

$$\frac{dW}{dx} = \pm \sqrt{2m(E - V(x))}, \quad W(x) = \pm \int_x \sqrt{2m(E - V(x'))} dx'$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = 0, \quad \frac{\partial \rho}{\partial x} + \frac{1}{m} \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho \frac{\partial S}{\partial x} \right) = 0 \quad (\text{rovnice kontinuity})$$

$$\rho \frac{dW}{dx} = \pm \rho \sqrt{2m(E - V(x))} = \text{const}$$

$$\sqrt{\rho} = \frac{\text{const}}{\sqrt[4]{E - V(x)}} \sim \frac{1}{\sqrt{v}}$$

$$\Psi(x, t) = \frac{\text{const}}{\sqrt[4]{E - V(x)}} \exp\left(\pm \left(\frac{i}{\hbar}\right) \int_x dx' \sqrt{2m(E - V(x))} - \frac{iE}{\hbar}t\right)$$

což je WKB řešení

Srovnej:

→ pravděpodobnostní interpretace řešení harmonického oscilátoru

Podmínka platnosti WKB:

$$\hbar \left| \frac{d^2W}{dx^2} \right| \ll \left| \frac{dW}{dx} \right|^2$$

$$\lambda = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(E - V)}} \ll \frac{2(E - V)}{\frac{dV}{dx}}$$

~ charakteristická vzdálenost změny v

⇒ $\lambda \rightarrow 0!$

$E > V(x)$ → klasicky dovolená oblast

$E < V(x)$ → komplexní rozšíření

$$\psi(x, t) \sim \frac{\text{const}}{\sqrt[4]{V - E}} \exp\left(\pm \left(\frac{i}{\hbar}\right) \int_x dx' \sqrt{2m(E - V(x))} - \frac{iE}{\hbar}t\right)$$

neplatí pro $E = V!$, protože $\lambda \rightarrow \infty$

v okolí bodů x_1, x_2 je $E = V(x)$

tj. $V(x) = E - \left. \frac{dV}{dx} \right|_{x_0} (x - x_0) + \dots$, $x = x_1, x_2$

$$\frac{d^2u}{dx^2} - \frac{2m}{\hbar^2} \left. \frac{dV}{dx} \right|_{x=x_0} (x - x_0)u = 0$$

tj. řešit Schrödingerovu rovnici pro konstantní sílu (např. gravitační potenciál,...)

oblast I → II:

$$\Psi \sim \frac{1}{\sqrt[4]{E - V(x)}} \exp \left(-\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_1} dx' \overbrace{\sqrt{2m(V - E)}}^{p(x')} \right) \longrightarrow$$

$$\longrightarrow \frac{2}{\sqrt[4]{E - V(x)}} \cos \left[\underbrace{\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_1} dx' p(x')}_{\text{arg}(1)} - \frac{\pi}{4} \right]$$

oblast III \rightarrow II:

$$\Psi \sim \frac{1}{\sqrt[4]{E - V(x)}} \exp \left(-\frac{1}{\hbar} \int_{x_2}^x dx' \sqrt{2m(V - E)} \right) \longrightarrow$$

$$\longrightarrow \frac{2}{\sqrt[4]{E - V(x)}} \cos \left[\underbrace{\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_2} dx' p(x')}_{\text{arg}(2)} - \frac{\pi}{4} \right]$$

pak

$$\text{arg}(1) - \text{arg}(2) = n\pi \quad (\text{jednoznačnost v oblasti II})$$

tedy

$$\int_{x_1}^{x_2} dx' \sqrt{2m(V - E)} = (n + 1/2)\pi \hbar$$

(Sommerfeldova kvantová podmínka $\oint pdq = n\hbar$)

argument $\frac{\pi}{4}$:

$$V(x) - E \sim \frac{dV}{dx}(x - x_0)$$

$$V(x) - E \rightarrow E - V(x) = (-1)(V(x) - E) = e^{i\pi}(V(x) - E)$$

$$\sqrt[4]{\frac{dV}{dx}(x - x_0)} \longrightarrow \text{změna o } e^{i\frac{\pi}{4}}$$

Příklad: "volný pád"

$$V = \begin{cases} mgh & , x > 0 \\ \infty & , x < 0 \end{cases}$$

→ modifikujeme

$$V = mg|x| \quad , \quad x \in (-\infty, \infty)$$

lichá řešení $\Psi = 0$, pak $x_1 = -\frac{E}{mg}$, $x_2 = \frac{E}{mg}$

$$\Rightarrow \int_{-\frac{E}{mg}}^{\frac{E}{mg}} dx \sqrt{2m(E - mg|x|)} = (2k - 1 + 1/2)\pi\hbar \quad , \quad k = 1, 2, \dots$$

$$\Leftrightarrow \int_0^{\frac{E}{mg}} dx \sqrt{2m(E - mgx)} = (k - 1/4)\pi\hbar$$

Pak

$$E_k = \frac{[3(n - 1/4)\pi]^{2/3}}{2} \cdot (mg^2\hbar^2)^{1/3}$$

→ souhlasí s přesným řešením

Model pro vazbu quark - antiquark $mg = F \sim 10^5 N$

Viriálový teorém:

V rovnovážném stavu je potenciální a kinetická energie rozdělena následujícím způsobem

$$2\langle T \rangle = \langle \vec{r} \cdot \nabla V \rangle$$

Důkaz:

$$\left\langle \frac{d}{dt}(\vec{r} \cdot \vec{p}) \right\rangle_E = \frac{1}{i\hbar} \langle [\vec{r}\vec{p}, \mathbf{H}] \rangle_E = 0$$

$$\mathbf{H} = \frac{\vec{p}}{2m} + V(\vec{x}) \quad , \quad \text{přitom} \quad \left[\mathbf{x}_i \mathbf{p}_i, \frac{\mathbf{p}_j^2}{2m} \right] = \frac{\mathbf{p}_i \mathbf{p}_i}{m}$$

$$[\mathbf{x}_i \mathbf{p}_i, V] = -i\hbar x_i \frac{\partial V}{\partial x_i}$$

Propagátor a Feynmanův dráhový integrál

$$\langle x' | \alpha, t_0, t \rangle = \sum_{a'} \langle x' | a' \rangle \langle a' | \alpha, t_0 \rangle \exp \left(-\frac{iE}{\hbar} (t - t_0) \right)$$

$$\langle a' | \alpha, t_0 \rangle = \int d^3x' \langle a' | x' \rangle \langle x' | \alpha, t_0 \rangle$$

tj. baze $|x'\rangle$... vlnová funkce
 $|a'\rangle$... dynamika

pak

$$\Psi(x'', t) = \int d^3x' K(x'', t, x', t_0) \Psi(x', t_0)$$

$$K(x'', t, x', t_0) = \langle x'' | e^{-\frac{i\mathbf{H}(t-t_0)}{\hbar}} | x' \rangle = \sum \langle x'' | a' \rangle \langle a' | x' \rangle e^{-\frac{iE(t-t_0)}{\hbar}}$$

Princip kauzality v integrální rovnici \rightarrow propagátor K

1. K splňuje Schrödingerovu rovnici

2. počáteční podmínka $\lim_{t \rightarrow t_0} K(x'', t, x', t_0) = \delta^3(x'' - x')$
 $\Rightarrow K$ je Greenova funkce!!

\rightarrow srovnej $\Phi(x) = \frac{1}{4\pi\epsilon} \int d^3x' \frac{\rho(x')}{|x - x'|}$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla''^2 + V(x'') - i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right) K(x'', t, x', t_0) = -i\hbar \delta^3(x'' - x') \delta(t - t_0)$$

Důvod proč $\delta(t - t_0)$ vystupuje ve vyše zmíněné rovnici je diskontinuita, neboť pro $t < t_0$ je $K \equiv 0$, tj $K = \tilde{K} \cdot \Theta(t - t_0)$ (kauzalita).

Propagátor volné částice:

$$\mathbf{H} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m},$$

$$K(x'', t, x', t_0) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dp' \exp \left(i \frac{p'(x'' - x')}{\hbar} \right).$$

$$\exp\left(-\frac{ip'^2}{2m\hbar}(t-t_0)\right) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar(t-t_0)}} \exp\left(\frac{im(x''-x')^2}{2\hbar(t-t_0)}\right).$$

Propagátor a statistická fyzika:

$$G(t) = \int d^3x' K(x', t, x', 0) = \sum_{a'} \int d^3x' |\langle x' | a' \rangle|^2,$$

$$e^{-i\frac{Et}{\hbar}} = \sum_{a'} e^{-i\frac{E_a t}{\hbar}},$$

$$\beta = \frac{it}{\hbar}; G \rightarrow z(\beta) = \sum_{a'} e^{-\beta E_a} \quad (\text{partiční suma}).$$

Propagátor = amplituda přechodu

$$K(x'', t, x', t_0) = \langle x'', t | x', t_0 \rangle,$$

relace úplnosti: $\forall t; \int |x, t\rangle \langle x, t| d^3x = 1.$

pak

$$\langle x^{(3)}, t^{(3)} | x^{(1)}, t^{(1)} \rangle =$$

$$= \int dx^{(2)} \langle x^{(3)}, t^{(3)} | x^{(2)}, t^{(2)} \rangle \langle x^{(2)}, t^{(2)} | x^{(1)}, t^{(1)} \rangle.$$

$$t^{(3)} \leq t^{(2)} \leq t^{(1)} \quad \text{atd.}$$

Zákon skládání amplitud přechodu

tj.

$$K(x_n, t_n, x_0, t_0) = \int dx_{n-1} K(x_n, t_n, x_{n-1}, t_{n-1}),$$

$$\int dx_{n-2} K(x_{n-1}, t_{n-1}, x_{n-2}, t_{n-2}) \dots K(x_1, t_1, x_0, t_0).$$

→ základ pro dráhový integrál

akce

$$S = \int_{t_1}^{t_2} L(q, \dot{q}t) dt$$

Klasická mechanika $\rightarrow \delta S = 0 \rightarrow$ odpovídá jediná dráha.

\rightarrow Princip minimální akce

Kvantová mechanika \rightarrow všechny dráhy interferují

$$\langle x_2, t_2, x_1, t_1 \rangle \sim \exp \left(i \frac{\int_{t_1}^{t_2} L(q, \dot{q}t) dt'}{\hbar} \right)$$

... je váhový faktor dráhy (q, \dot{q})

$$\langle x_N, t_N, x_1, t_1 \rangle = \int_{x_1}^{x_N} \mathcal{D}(x(t)) \exp \left(i \int_{t_1}^{t_N} dt \frac{L}{\hbar} \right)$$

Feynmanův dráhový integrál

$$\langle x_N, t_N, x_1, t_1 \rangle = \int dx_{N-1} \langle x_N, t_N, x_{N-1}, t_{N-1} \rangle$$

$$\begin{aligned} & \langle x_{N-1}, t_{N-1}, x_1, t_1 \rangle = \\ & = \int dx_{N-1} \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t}} \exp \left(\frac{im}{2\hbar} \frac{(x_N - x_{N-1})^2}{\Delta t} - \frac{iV \Delta t}{\hbar} \right) K(x_{N-1}, t_{N-1}, x_1, t_1) \end{aligned}$$

Nechť $x_N - x_{N-1} = \xi \rightarrow$ malé ; $t_N - t_{N-1} = \Delta t$, pak

$$\langle x, t+\Delta t, x_1, t_1 \rangle = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\Delta t}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi \exp\left(\frac{im\xi^2}{2\hbar\Delta t} - \frac{iV\Delta t}{\hbar}\right) \langle x-\xi, t, x_1, t_1 \rangle .$$

Potom

$$L \sim \Delta t \frac{\partial}{\partial t} \langle x, t | x_1, t_1 \rangle$$

$$p \sim \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi \exp\left(\frac{im\xi^2}{2\hbar\Delta t}\right) \left(1 - \frac{iV\Delta t}{\hbar} + \dots\right) \cdot \left(\langle x, t, x_1, t_1 \rangle - \xi \frac{\partial}{\partial x} \langle x, t, x_1, t_1 \rangle + \frac{1}{2} \xi^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \langle x, t, x_1, t_1 \rangle - \dots\right)$$

\rightarrow v daném rozvoji do úvahy zahrneme pouze členy do řádu $(\Delta t)^1$, pak

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle x, t, x_1, t_1 \rangle = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V\right) \langle x, t, x_1, t_1 \rangle ,$$

protože

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\xi \xi^2 \exp\left(\frac{im\xi^2}{2\hbar\Delta t}\right) = \sqrt{2\pi} \left(\frac{i\hbar\Delta t}{m}\right)^{3/2} .$$

Lekce 6: Kalibrační invariance v kvantové mechanice

Potenciál a kalibrační transformace:

$$\tilde{V}(x) = V(x) + V_0$$

$$\longrightarrow \text{nezmění sílu } F = - \text{grad } \tilde{V}(x) = - \text{grad } V(x)$$

$$\begin{aligned} |\alpha, t_0; t\rangle &= e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{H} (t-t_0)} |\alpha, t_0\rangle = \\ &= e^{\frac{i}{\hbar} V_0 (t-t_0)} |\alpha, t_0; t\rangle \end{aligned}$$

Kalibrační teorie: $E \longrightarrow E + V_0$

\longrightarrow změna fáze kvantového stavu \longrightarrow interference.

$$\text{Interference} \sim \cos \left(\overbrace{\Phi_1 - \Phi_2}^{\Delta\Phi} \right), \quad \Delta\Phi \sim \frac{V_0 (t - t_0)}{\hbar}$$

$$\lim \hbar \rightarrow 0 \implies \text{interference vymizí.}$$

Experiment: \rightarrow gravitační síla

klasicky

$$m \ddot{x} = m \nabla \Phi_{gm} = - mg\vec{z}$$

kvantově

$$\left(- \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + m \Phi_{gm} \right) \Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}$$

$$\longrightarrow \text{závisí na } \left(\frac{\hbar}{m} \right) !!$$

Feynmanův integrál:

$$\langle x_n, t_n; x_{n-1}, t_{n-1} \rangle = \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar\Delta t}} \exp \left\{ i \int_{t_{n-1}}^{t_n} \frac{m}{\hbar} \left(\frac{1}{2} \dot{x}^2 - g\vec{z} \right) dt \right\}$$

závisí na $\frac{m}{\hbar}$, ale

$$\frac{d^2}{dt^2} \langle x \rangle = -g\vec{z} \quad \text{nezávisí na } m \quad (\text{Ehrenfestův teorém})$$

Kvantová předpověď:

→ netriviální závislost dynamiky na $\frac{m}{\hbar}$.

Gravitace je příliš slabá na mikroskopické úrovni!

Př.:

Bohrův poloměr atomu:

$$\frac{mv^2}{r} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r^2} \quad \text{a} \quad mrv = n\hbar \quad \Leftrightarrow \quad n\lambda = 2\pi r, \quad \text{kde } n \in \mathcal{N}$$

$$\Rightarrow a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{e^2m_e}, \quad a_0 = 10^{-10}m \approx 1\text{\AA}$$

Gravitační působení mezi neutronem a elektronem:

$$a_G = \frac{\hbar^2}{G_N m_e^2 m_N}, \quad \frac{F_E}{F_G} \approx 10^{39}$$

Interference indukovaná gravitačním polem (Werner 1975)

→ neutronový interferometr

$$\text{rozdíl fází: } \Delta\Phi = -\frac{V_0}{\hbar} \Delta t$$

$$\Delta t = \frac{l_1}{v}; \quad V_0 = m_n g l_2 \sin \delta$$

$$\Rightarrow -\frac{m_n g l_2 \sin \delta}{\hbar} \frac{l_1}{v} = -\frac{m_n^2 g l_1 l_2 \lambda \sin \delta}{\hbar^2}, \quad \lambda = \frac{\hbar}{m_n v}$$

Mechanické vysvětlení:

$$\frac{p^2}{2m} + mgz = E$$

změna výšky z → změna impulzu p → změna vlnové délky λ

→ efekt je pozorovatelný !

$$\text{pro } \lambda_0 = 1.42 \text{Å} , l_1 l_2 = 10 \text{cm}^2 \quad \Rightarrow \quad \Delta\Phi \sim 55.6 \approx 9 \cdot 2\pi$$

Kalibrační invariance a elmag. pole:

$$\vec{E} = - \text{grad}\Phi , \quad \vec{B} = \text{rot}\vec{A}$$

$$\mathbf{H} = \frac{1}{2m} (\mathbf{p} - e\vec{A})^2 + e\Phi , \text{ kde}$$

$$(\vec{\mathbf{p}} - e\vec{A})^2 = \mathbf{p}^2 - e\vec{A}\vec{\mathbf{p}} - e\vec{\mathbf{p}}\vec{A} + e^2 A^2$$

Dynamika:

$$\frac{d\vec{\mathbf{x}}}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [d\vec{\mathbf{x}}, \mathbf{H}] = \frac{\vec{\mathbf{p}} - e\vec{A}}{m} ,$$

tedy $\frac{d\vec{\mathbf{x}}}{dt} \cdot m \neq \vec{\mathbf{p}} !$, $\vec{\mathbf{p}}$... kanonický impuls

$$\vec{\boldsymbol{\pi}} = m \frac{d\vec{\mathbf{x}}}{dt} = \vec{\mathbf{p}} - e\vec{A} \quad \dots \quad \text{kinematický impuls}$$

$$[\mathbf{p}_i, \mathbf{p}_j] = 0 \quad \text{ale} \quad [\boldsymbol{\pi}_i, \boldsymbol{\pi}_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} B_k$$

$$\Rightarrow \quad \mathbf{H} = \frac{\boldsymbol{\pi}^2}{2m} + e\Phi$$

Ehrenfestův teorém → definice Lorentzovy síly:

$$m \frac{d^2\vec{\mathbf{x}}}{dt^2} = \frac{d\vec{\boldsymbol{\pi}}}{dt} = e \left[\vec{E} + \frac{1}{2} \left(\frac{d\vec{\mathbf{x}}}{dt} \times \vec{B} - \vec{B} \times \frac{d\vec{\mathbf{x}}}{dt} \right) \right]$$

Shrödingerova vlnová rovnice:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2m} [-i\hbar\nabla' - eA(x')] [-i\hbar\nabla' - eA(x')] \langle x' | \alpha, t_0, t \rangle + \\ + e\Psi(x') \langle x' | \alpha, t_0, t \rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle x' | \alpha, t_0, t \rangle \end{aligned}$$

Rovnice kontinuity:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div} \vec{j} = 0, \quad \text{kde}$$

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{m} \text{Im} (\Psi^* \nabla' \Psi) - \frac{e}{m} A |\Psi|^2$$

(formálně však platí přechod $\nabla' \rightarrow \nabla' - \frac{ie}{\hbar} A$)

$$\int \vec{j}(x') d^3x' = \frac{\langle \boldsymbol{\pi} \rangle}{m}$$

Kalibrační transformace

$$\phi \rightarrow \phi, \quad \vec{A} \rightarrow \vec{A} + \text{grad } \Lambda$$

$$\left(\begin{array}{l} \text{obecně ale platí} \quad \phi \rightarrow \phi - \frac{\partial \Lambda}{\partial t}, \quad \vec{A} \rightarrow \vec{A} + \text{grad } \Lambda, \\ \text{pro } \vec{E} = -\text{grad } \phi - \frac{\partial \vec{A}}{\partial t}, \quad \vec{B} = \text{rot } \vec{A} \end{array} \right)$$

Např.: $\vec{B} = (0, 0, B)$ dostaneme pro $\vec{A} = \left(-\frac{B_y}{2}, \frac{B_x}{2}, 0 \right)$ nebo $(B_y, 0, 0)$
 \vec{p} není kalibračně ekvivalentní, $\vec{\pi}$ však je.

Je-li $\tilde{A} = A + \text{grad } \Lambda$, pak

$$|\alpha\rangle \rightarrow |\tilde{\alpha}\rangle = ?$$

Požadujeme:

$$\langle \alpha | \mathbf{x} | \alpha \rangle = \langle \tilde{\alpha} | \mathbf{x} | \tilde{\alpha} \rangle \quad \text{pro libovolný operátor } \mathbf{x}$$

$$\langle \alpha | \alpha \rangle = \langle \tilde{\alpha} | \tilde{\alpha} \rangle$$

$$|\tilde{\alpha}\rangle = \mathbf{G} |\alpha\rangle$$

$$\text{tj.: } \mathbf{G}^\dagger \vec{x} \mathbf{G} = \vec{x}, \quad \mathbf{G}^\dagger (\vec{p} - e\vec{A} - e \text{grad } \Lambda) \mathbf{G} = \vec{p} - e\vec{A}$$

$$\Rightarrow \mathbf{G} = \exp\left(i \frac{e}{\hbar} \Lambda\right), \quad \text{protože}$$

$$\begin{aligned} & \exp\left(-i \frac{e}{\hbar} \Lambda\right) \mathbf{p} \exp\left(i \frac{e}{\hbar} \Lambda\right) = \exp\left(-i \frac{e}{\hbar} \Lambda\right) \left[\mathbf{p}, \exp\left(i \frac{e}{\hbar} \Lambda\right) \right] + \\ & + \mathbf{p} = -\exp\left(-i \frac{e}{\hbar} \Lambda\right) i\hbar \nabla \left(\exp\left(-i \frac{e}{\hbar} \Lambda\right) \right) + \mathbf{p} = \mathbf{p} + e \text{grad } \Lambda \end{aligned}$$

tj. při kalibrační transformaci platí:

$$|\alpha, t, t_0\rangle \longrightarrow |\tilde{\alpha}, t, t_0\rangle = \exp\left(i \frac{e}{\hbar} \Lambda\right) |\alpha, t, t_0\rangle$$

$$\tilde{\Psi}(x', t) = \exp\left(i \frac{e}{\hbar} \Lambda\right) \Psi(x', t)$$

$S \longrightarrow S + e\Lambda$, $A \longrightarrow A + g$, protože

$$\vec{j} = \frac{\rho}{m} (\nabla S + e\Lambda) \longrightarrow \text{invariant}$$

Bohm - Aharonovův efekt (1959)

$$\vec{F} = e(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B}); \quad \vec{E} = \vec{B} = 0 \longrightarrow \vec{F} = 0$$

$$\Delta\phi = (\vec{k}_1 - \vec{k}_2) \cdot \vec{r} \approx \Delta k \cdot x,$$

$$\Delta k = \frac{2\pi}{\lambda} \cdot \theta = \frac{2\pi}{\lambda} \frac{d}{L}$$

$$\implies \Delta\phi = \frac{2\pi}{\lambda} \frac{d}{L}$$

$$I = I_0 (1 + \cos \Delta\phi) \quad \Delta\Phi = 2\pi n \quad \dots \quad \text{maximum}$$

$$= (2n + 1)\pi \quad \dots \quad \text{minimum}$$

Bohm - Aharonov

\longrightarrow elektronový rozptyl na dvojštěrbíně ovlivněný solenoidem magnetického pole

uvnitř cívky:

$$A_r = A_z = 0$$

$$A_\phi = \frac{Br}{2}$$

vně cívky:

$$A_r = A_z = 0$$

$$A_\phi = \frac{BR^2}{2r}$$

$$\vec{B} = \text{rot } \vec{A}, \quad B_z = \frac{1}{r} \left[\frac{\partial(rA_\phi)}{\partial r} - \frac{\partial A_r}{\partial \phi} \right]$$

uvnitř cívky: $B_r = B_\phi = 0, B_z = B$

vně cívky: $B_r = B_\phi = B_z = 0$

elektron \bar{e} jako volná částice \sim vlna v elmag. poli

$$\implies \Psi = |\Psi| \cdot e^{i\vec{p}\vec{r}} = |\Psi| e^{i\alpha}$$

$$p \longrightarrow \vec{p} - e\vec{A}, \quad \alpha \longrightarrow \alpha - \frac{e}{\hbar} \vec{A} \cdot \vec{r}$$

$$\text{celkem } \Delta\alpha = -\frac{e}{\hbar} \int_{(\text{dráha})} \vec{A} d\vec{r}$$

$$\text{tj. } \Delta\alpha_1 = -\frac{e}{\hbar} \int_{(1)} \vec{A} d\vec{r}, \quad \Delta\alpha_2 = -\frac{e}{\hbar} \int_{(2)} \vec{A} d\vec{r}$$

$$\delta\varphi = \Delta\alpha_1 - \Delta\alpha_2 = \frac{e}{\hbar} \int_{(2)-(1)} \vec{A} d\vec{r} \quad \text{Stokesova věta}$$

$$= \frac{e}{\hbar} \int_{(S)} \text{rot } \vec{A} d\vec{r} = \frac{e}{\hbar} \int_{(S)} \vec{B} d\vec{S} = \frac{e}{\hbar} \Phi$$

Φ ... magnetický tok

Magnetické pole neovlivňuje směr dráhy elektronu \bar{e} , nicméně $\Phi \neq 0$ a dojde k posunu interferenčních proužků.

Závislost gravitačně indukovaného posuvu fáze na úhlu rotace:

Lekce 7: Rotace a impulsmoment

$$\text{rotace} \quad \begin{pmatrix} v'_x \\ v'_y \\ v'_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} & & \\ & R & \\ & & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_x \\ v_y \\ v_z \end{pmatrix}$$

$$RR^T = R^T R = \mathbf{1}, \quad \sqrt{\mathbf{v}'^2_x + \mathbf{v}'^2_y + \mathbf{v}'^2_z} = \sqrt{\mathbf{v}^2_x + \mathbf{v}^2_y + \mathbf{v}^2_z}$$

Rotace \longrightarrow nekomutující operace

$$R_z\left(\frac{\pi}{2}\right)R_x\left(\frac{\pi}{2}\right) \neq R_x\left(\frac{\pi}{2}\right)R_z\left(\frac{\pi}{2}\right)$$

$$R_z(\phi) = \begin{pmatrix} \cos \phi & -\sin \phi & 0 \\ \sin \phi & \cos \phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{konečná rotace}$$

$$R_z(\epsilon) = \begin{pmatrix} 1 - \frac{\epsilon^2}{2} & -\epsilon & 0 \\ \epsilon & 1 - \frac{\epsilon^2}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{infinitesimální rotace}$$

$R_x, R_y \dots$ cyklicky $x \longrightarrow y, y \longrightarrow z, z \longrightarrow x$

$$R_x(\epsilon)R_y(\epsilon) - R_y(\epsilon)R_x(\epsilon) = \begin{pmatrix} 0 & -\epsilon^2 & 0 \\ \epsilon^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = R_z(\epsilon^2) - 1$$

Rotace v 3D prostoru:

Reprezentace: $|\alpha\rangle_R = \mathcal{D}(R) |\alpha\rangle$

$$\mathcal{D} = \mathbf{1} - i\mathbf{G}\epsilon \quad (\text{Drehung} = \text{rotace})$$

Je to unitární reprezentace, kde \mathbf{G} je hermitovský operátor

$$\mathbf{G} \longrightarrow \frac{\mathbf{J}_k}{\hbar}, \quad k = 1, 2, 3$$

obecně

$$\mathcal{D}(\vec{n}, \phi) = \mathbf{1} - i \frac{\vec{\mathbf{J}}\vec{n}}{\hbar} \phi$$

Př.:

$$\mathcal{D}_z(\phi) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\mathbf{1} - i \frac{\mathbf{J}_3}{\hbar} \frac{\phi}{N} \right)^N = \exp \left(- \frac{i\mathbf{J}_3}{\hbar} \phi \right)$$

$$\begin{array}{ccc} \underline{\text{Vlastnosti } \mathbf{R}} & \longrightarrow & \underline{\text{Vlastnosti } \mathcal{D}} \\ (\text{matice } 3 \times 3) & & (\text{unitární reprezentace grupy rotací}) \end{array}$$

$$\text{Identita } R \cdot \mathbf{1} = R \longrightarrow \mathcal{D}(R) \cdot \mathbf{1} = \mathcal{D}$$

$$\text{Skládání } R_1 \cdot R_2 = R_3 \longrightarrow \mathcal{D}(R_1) \cdot \mathcal{D}(R_2) = \mathcal{D}(R_3)$$

$$\text{Inverze } R \cdot R^{-1} = R_{-1} \cdot R = \mathbf{1} \longrightarrow \mathcal{D}(R) \cdot \mathcal{D}^{-1}(R_1) = \mathbf{1}$$

Komutativní zákon **neplatí!**

$$\text{Asociativní zákon } R_1 (R_2 R_3) = (R_1 R_2) R_3 = R_1 R_2 R_3$$

podobně

$$\mathcal{D}(R_1) [\mathcal{D}(R_2)\mathcal{D}(R_3)] = [\mathcal{D}(R_1)\mathcal{D}(R_2)] \mathcal{D}(R_3) = \mathcal{D}(R_1)\mathcal{D}(R_2)\mathcal{D}(R_3)$$

Z komutačního zákona pro $R_{x,y,z}$ vyplývá:

$$\begin{array}{l} [\mathbf{J}_x, \mathbf{J}_y] = i\hbar\mathbf{J}_z \quad \text{obecně } [\mathbf{J}_i, \mathbf{J}_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}\mathbf{J}_k \\ \longrightarrow \quad \text{komutační pravidla pro úhlový moment} \end{array}$$

Příklad: spin 1/2

$$\mathbf{S}_x = \frac{\hbar}{2} (|+\rangle\langle -| + |-\rangle\langle +|)$$

$$\mathbf{S}_y = i \frac{\hbar}{2} (- |+\rangle\langle -| + |-\rangle\langle +|) \quad \text{je realizace } \vec{j} \text{ na 2-dimenzionálním}$$

prostoru

$$\mathbf{S}_z = \frac{\hbar}{2} (|+\rangle\langle+| - |-\rangle\langle-|)$$

$$|\alpha\rangle_R = \mathcal{D}_z(\phi) |\alpha\rangle, \quad \mathcal{D}_z = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \mathbf{S}_z \phi\right).$$

Pak např.:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{S}_x \rangle &= {}_R\langle \alpha | \mathbf{S}_x | \alpha \rangle_R = \langle \alpha | \mathcal{D}_z^\dagger \mathbf{S}_x \mathcal{D}_z | \alpha \rangle \\ \implies e^{i \frac{S_z}{\hbar} \phi} (|+\rangle\langle-| + |-\rangle\langle+|) e^{-i \frac{S_z}{\hbar} \phi} &= \mathbf{S}_x \cos \phi + \mathbf{S}_y \sin \phi. \end{aligned}$$

Analogicky

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{S}_y \rangle &\longrightarrow \langle \mathbf{S}_y \rangle \cos \phi + \langle \mathbf{S}_x \rangle \sin \phi \\ \langle \mathbf{S}_z \rangle &\longrightarrow \langle \mathbf{S}_z \rangle. \end{aligned}$$

Tedy

$$\langle \mathbf{S}_k \rangle = \sum_l R_{kl} \langle \mathbf{S}_l \rangle \quad (\text{vektorová transformace}).$$

Ale

$$\begin{aligned} |\alpha\rangle &= |+\rangle\langle+|\alpha\rangle + |-\rangle\langle-|\alpha\rangle \\ \longrightarrow e^{-i \frac{S_z}{\hbar} \phi} |\alpha\rangle &= e^{-i \frac{\phi}{2}} |+\rangle\langle+|\alpha\rangle + e^{i \frac{\phi}{2}} |-\rangle\langle-|\alpha\rangle \\ \implies |\alpha\rangle_{R_z(2\pi)} &= -|\alpha\rangle! \end{aligned}$$

Transformace = precese spinu !!

$$H = - \left(\frac{e}{m_e} \right) \vec{S} \cdot \vec{B} = \omega_z S_z$$

$$\omega = \frac{|e|B}{m_e}, \text{ pak } U(t,0) = e^{-\frac{i\omega t}{\hbar}}; \quad t = \frac{2\pi}{\omega} \quad \dots \quad \text{perioda precese}$$

$$t = 2 \cdot \frac{2\pi}{\omega} = \frac{4\pi}{\omega} \quad \text{perioda vývoje stavu spinoru}$$

Experiment: Neutronová interferometrie, (Rauch 1975)

Precese spinu neutronu v magnetickém poli

$$\omega = g_n \cdot \frac{|e|B}{m_p}, \quad \mu = \frac{e\hbar}{m_p} \quad \text{magnetický moment, } g_n = -1.91$$

Interference $I \sim \cos\left(\pm\frac{\omega T}{2} + \delta\right)$

Podmínka pro maximum:

$$\Delta\phi = 2\pi \quad \longrightarrow \quad \Delta B = \frac{4\pi\hbar}{eg_n l \lambda}$$

Pauliho formalismus: (1926)

$$|+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \chi_+, \quad |-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \chi_-$$

$$\langle +| = (1, 0) = \chi_+^\dagger, \quad \langle -| = (0, 1) = \chi_-^\dagger$$

vektory = spinory

$$\mathbf{S}_k = \frac{\hbar}{2} \cdot \boldsymbol{\sigma}_k ;$$

$$\boldsymbol{\sigma}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\sigma}_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\sigma}_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{\sigma}_i^2 = 1, \quad i = 1, 2, 3$$

$$\{\boldsymbol{\sigma}_i, \boldsymbol{\sigma}_j\} = 2\delta_{ij}, \quad [\boldsymbol{\sigma}_i, \boldsymbol{\sigma}_j] = 2i\varepsilon_{ijk}\boldsymbol{\sigma}_k$$

$$\implies \boldsymbol{\sigma}_i\boldsymbol{\sigma}_j = \delta_{ij} + i\varepsilon_{ijk}\boldsymbol{\sigma}_k$$

$$\boldsymbol{\sigma}_1\boldsymbol{\sigma}_2 = -\boldsymbol{\sigma}_2\boldsymbol{\sigma}_1, \quad \boldsymbol{\sigma}_i^\dagger = \boldsymbol{\sigma}_i, \quad \det \boldsymbol{\sigma}_i = -1, \quad \text{Tr } \boldsymbol{\sigma}_i = 0$$

$$\vec{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \vec{a} = \sum_{k=1}^3 \boldsymbol{\sigma}_k a_k$$

$$\exp\left(-i \frac{\vec{\boldsymbol{\sigma}} \vec{n}}{2} \phi\right) = \cos \frac{\phi}{2} - i \vec{\boldsymbol{\sigma}} \vec{n} \sin \frac{\phi}{2}$$

$SU(2)$, $SO(3)$, Eulerovy úhly

Rotace v euklidovském prostoru je dána \vec{n} , φ ... 3 volné parametry (víme proč? pochopíme z analýzy volných parametrů...)

$$\mathbf{RR}^T = \mathbf{1} \quad \implies \quad 9 - 6 = 3 \text{ parametry}$$

Zobecníme-li rotaci v euklidovském prostoru, obdržíme nejprve rotaci na dvojdimenzionálním vektorovém prostoru (tj. prostor **spinorů** - zobecněných vektorů (c_+, c_-)), kterou popisuje grupa $SU(2)$. Zobecněnou rotaci na třídimeznionálním prostoru pak popisujeme grupou $SO(3)$.

$$|c_+|^2 + |c_-|^2 = 1 \quad (\text{norma})$$

Transformace na prostoru spinorů je **unitární** a $\det A = 1$. Tedy transformační matice \mathbf{A} má nutně v $SU(2)$ tvar

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{A}^{-1} = \mathbf{A}^\dagger \quad \text{a} \quad \det \mathbf{A} = 1, \quad \text{tj.} \quad a^2 + b^2 = 1;$$

$$\begin{pmatrix} a^* & -b \\ b^* & a \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{pmatrix} = \mathbf{1}$$

$$\text{tj.} \quad \begin{pmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{pmatrix} = \exp \left(-i \frac{\vec{\sigma} \vec{n}}{2} \phi \right)$$

$$R_{\text{obec}} = R(\alpha, \beta, \gamma) = R_{z'}(\gamma) R_{y'}(\beta) R_z(\alpha),$$

$\alpha, \beta, \gamma \quad \dots \quad \text{Eulerovy úhly}$

Dále platí:

$$R(\alpha, \beta, \gamma) = R_z(\alpha) R_y(\beta) R_z(\gamma)$$

Důkaz:

$$R_{y'}(\beta) = R_z(\alpha) R_y(\beta) R_z^{-1}(\alpha), \quad \text{pak}$$

$$\begin{aligned} R_{z'}(\gamma) R_{y'}(\beta) R_z(\alpha) &= R_{y'}(\beta) R_z(\gamma) R_{y'}^{-1}(\beta) R_{y'}(\beta) R_z(\alpha) = \\ &= R_{y'}(\beta) R_z(\gamma) R_z(\alpha) = R_z(\alpha) R_y(\beta) R_z^{-1}(\alpha) R_z(\gamma) = \\ &= R_z(\alpha) R_y(\beta) R_z(\gamma). \end{aligned}$$

Pak

$$\mathfrak{D}(\alpha, \beta, \gamma) = \mathfrak{D}_z(\alpha) \mathfrak{D}_y(\beta) \mathfrak{D}_z(\gamma) =$$

$$= e^{-\frac{\sigma_3\alpha}{2}} e^{-\frac{\sigma_2\beta}{2}} e^{-\frac{\sigma_3\gamma}{2}},$$

což je ireducibilní reprezentace grupy rotací

$$\mathcal{D}_{m',m}^{1/2}(\alpha, \beta, \gamma) = \langle j = 1/2, m' | \mathcal{D}(\alpha, \beta, \gamma) | m, j = 1/2 \rangle$$

Ireducibilní reprezentace operátoru úhlového momentu (Born, Heisenberg, Jordan 1926)

$$\mathbf{J}^2 = \mathbf{J}_i \mathbf{J}_i = \mathbf{J}_x^2 + \mathbf{J}_y^2 + \mathbf{J}_z^2$$

$$[\mathbf{J}^2, \mathbf{J}_k^2] = 0 \quad \Rightarrow \quad \text{existuje společná osa}$$

Studujme $\mathbf{J}^2, \mathbf{J}_3$

Nechť $\mathbf{J}_\pm = \mathbf{J}_1 \pm i\mathbf{J}_2 \dots$ posunovací operátory, pak

$$[\mathbf{J}^2, \mathbf{J}_\pm] = 0, \quad [\mathbf{J}_3, \mathbf{J}_\pm] = \pm \hbar \mathbf{J}_\pm.$$

Označme $\mathbf{J}^2 |a, b\rangle = a |a, b\rangle$, $\mathbf{J}^2 |a, b\rangle = \mathbf{J}^2 |a, b\rangle$

pak

$$\mathbf{J}_3 (\mathbf{J}_\pm |a, b\rangle) = (b \pm \hbar) (\mathbf{J}_\pm |a, b\rangle)$$

$$\mathbf{J}^2 (\mathbf{J}_\pm |a, b\rangle) = \mathbf{J}_\pm (\mathbf{J}^2 |a, b\rangle) = a (\mathbf{J}_\pm |a, b\rangle)$$

$$\Rightarrow \mathbf{J}_\pm |a, b\rangle = c_\pm |a, b \pm \hbar\rangle.$$

Platí

$$\mathbf{J}^2 - \mathbf{J}_3^2 = \frac{1}{2} (\mathbf{J}_+ \mathbf{J}_- + \mathbf{J}_- \mathbf{J}_+) \geq 0;$$

proto existuje b_{\max} tak, že $\mathbf{J}_+ |a, b_{\max}\rangle = 0$

$$\Rightarrow \mathbf{J}_- \mathbf{J}_+ |a, b_{\max}\rangle = 0$$

$$(\mathbf{J}^2 - \hbar \mathbf{J}_3 - \mathbf{J}_3^2) |a, b_{\max}\rangle = 0,$$

$$\Rightarrow a = b_{\max}(b_{\max} + \hbar)$$

Podobně:

$$\mathbf{J}_- |a, b_{\min}\rangle = 0 \quad \rightarrow \quad \mathbf{J}_+ \mathbf{J}_- |a, b_{\min}\rangle = 0$$

$$\mathbf{J}_+ \mathbf{J}_- = \mathbf{J}^2 - \mathbf{J}_3^2 + \hbar \mathbf{J}_3, \quad a = b_{\min}(b_{\min} - \hbar)$$

$\implies b_{\max} = -b_{\min}$ a $-b_{\max} \leq b \leq b_{\max}$, pak

$b_{\max} = b_{\min} + n\hbar \dots$ konečný počet kroků $\Leftrightarrow 2b_{\max} = n\hbar$.

Nechť $j = \frac{b_{\max}}{\hbar}$, potom $j = \frac{n}{2}$.

Maximální hodnota \mathbf{J}_3 je celé nebo polovinové číslo.

$$a = b_{\max}(b_{\max} + \hbar) \longrightarrow a = \hbar^2 j(j+1).$$

Nechť $b = m \cdot \hbar$, $m \in \underbrace{\{-j, -j+1, \dots, 0, \dots, j-1, j\}}_{2j+1 \text{ stavů}}.$

Potom

$$\mathbf{J}^2 |j, m\rangle = \hbar^2 j(j+1) |j, m\rangle$$

$$\mathbf{J}_3 |j, m\rangle = m\hbar |j, m\rangle$$

Lekce 8: Orbitální impulsmoment, Schrödingerova rovnice pro atom vodíku

$$\vec{\mathbf{L}} = \vec{r} \times \vec{p} \quad ; \quad [\mathbf{L}_i, \mathbf{L}_j] = i\varepsilon_{ijk}\hbar\mathbf{L}_k$$

$$1 - i \frac{\delta\phi}{\hbar}\mathbf{L}_z = 1 - i \frac{\delta\phi}{\hbar}(x\mathbf{p}_y - y\mathbf{p}_x) \quad , \quad \text{t.j.}$$

$$\begin{aligned} \left[1 - i\mathbf{L}_z \frac{\delta\phi}{\hbar}\right] |x', y', z'\rangle &= \left(1 - i \frac{\mathbf{p}_y}{\hbar}\delta\phi x' + i \frac{\mathbf{p}_x}{\hbar}\delta\phi y'\right) |x', y', z'\rangle = \\ &= |x' - y'\delta\phi, y' + x'\delta\phi, z'\rangle . \end{aligned}$$

Proto

$$\begin{aligned} \langle x', y', z' | \left(1 - i \frac{\delta\phi}{\hbar}\mathbf{L}_z\right) |\alpha\rangle &= \langle x' + y'\delta\phi, y' - x'\delta\phi, z' | \alpha\rangle = \\ &= \langle r, \theta, \varphi - \delta\phi | \alpha\rangle = \langle r, \theta, \varphi | \alpha\rangle - \delta\phi \frac{\partial}{\partial\varphi} \langle r, \theta, \varphi | \alpha\rangle . \end{aligned}$$

$$\langle \vec{x}' | \mathbf{L}_z | \alpha\rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial\varphi} \langle x', \alpha\rangle ,$$

$$\langle \vec{x}' | \mathbf{L}_x | \alpha\rangle = -i\hbar \left(-\sin\phi \frac{\partial}{\partial\theta} - \cotg\theta \cos\phi \frac{\partial}{\partial\theta} \right) ,$$

$$\langle \vec{x}' | \mathbf{L}_y | \alpha\rangle = -i\hbar \left(\cos\phi \frac{\partial}{\partial\theta} - \cotg\theta \sin\phi \frac{\partial}{\partial\theta} \right) \langle \vec{x}', \alpha\rangle ,$$

$$\langle \vec{x}' | \mathbf{L}^2 | \alpha\rangle = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\phi^2} + \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\phi \frac{\partial}{\partial\theta} \right) \right] .$$

Kinetická energie vs. L^2 :

$$\mathbf{L}^2 = x^2 \mathbf{p}^2 - (\vec{x} \cdot \vec{\mathbf{p}})^2 + i\hbar \vec{x} \cdot \vec{\mathbf{p}}$$

Důkaz:

$$\begin{aligned} \mathbf{L}^2 &= \varepsilon_{ijk} x_i \mathbf{p}_j \varepsilon_{lmk} x_l \mathbf{p}_m = (\delta_{il} \delta_{jm} - \delta_{im} \delta_{jl}) x_i \mathbf{p}_j x_l \mathbf{p}_m = \\ &= \delta_{il} \delta_{jm} x_i (x_l \mathbf{p}_j - i\hbar \delta_{jk}) \mathbf{p}_m - \delta_{im} \delta_{jl} x_i \mathbf{p}_j (\mathbf{p}_m x_l + i\hbar \delta_{ml}) = \\ &= x^2 \mathbf{p}^2 - i\hbar (\vec{x} \cdot \vec{\mathbf{p}}) - \delta_{im} \delta_{jl} x_i \mathbf{p}_m (x_l \mathbf{p}_j - i\hbar \delta_{lj}) - i\hbar (\vec{x} \cdot \vec{\mathbf{p}}) = \\ &= x^2 \mathbf{p}^2 - (\vec{x} \cdot \vec{\mathbf{p}})^2 + i\hbar (\vec{x} \cdot \vec{\mathbf{p}}) \end{aligned}$$

Platí:

$$\langle x' | (\vec{x} \cdot \vec{\mathbf{p}}) | \alpha \rangle = \vec{x}' \cdot (-i\hbar \nabla') \langle x' | \alpha \rangle =$$

$$= -i\hbar r' \frac{\partial}{\partial r'} \langle x' | \alpha \rangle, \quad \text{protože}$$

$$\vec{s} \cdot \text{grad } \phi = \frac{\phi(r + \vec{s} \cdot \varepsilon) - \phi}{\varepsilon}, \quad \text{kde } \phi = \langle x' | \alpha \rangle$$

$$\Rightarrow \langle (\vec{x} \cdot \vec{\mathbf{p}})^2 \rangle = -\hbar^2 r' \frac{\partial}{\partial r'} \left(r' \frac{\partial}{\partial r} \phi \right) = -\hbar^2 \left(r'^2 \frac{\partial}{\partial r'^2} \phi + r' \frac{\partial}{\partial r'} \phi \right).$$

$$\frac{1}{2m} \langle x' | \mathbf{p}^2 | \alpha \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial}{\partial r'^2} \langle x' | \alpha \rangle + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \langle x' | \alpha \rangle - \frac{1}{\hbar^2 r^2} \langle x' | \mathbf{L}^2 | \alpha \rangle \right).$$

Schrödingerova rovnice v centrálně symetrickém poli:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\mathbf{L}^2}{\hbar^2 r^2} \right) \phi + V(r) \phi = E \phi$$

$\frac{\mathbf{L}^2}{2mr^2}$... centrifugální potenciál

Keplerova úloha $V(r) = -\frac{\bar{e}^2}{r}$, kde $\bar{e} = \frac{e}{(4\pi\varepsilon_0)^{1/2}}$

Necht' $\phi(r, \theta, \varphi) = \frac{R(r)}{r} Y(\theta, \varphi)$

$$\implies \frac{\partial^2 R_l}{\partial r^2} + \left(\frac{2mE}{\hbar^2} + \frac{2m\bar{e}^2}{\hbar^2 r} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) R_l(r) = 0,$$

dále

$$\mathbf{L}^2 Y_{lm}(\theta, \varphi) = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}(\theta, \varphi), \text{ kde}$$

$$l \in \{0, 1, 2, \dots\}, \quad -l \leq m \leq l$$

1. Úhlová část $Y_{lm}(\theta, \varphi)$, resp. $Y_l^m(\theta, \varphi)$
 \longrightarrow kulové harmonické funkce

2. Radiální část $R_l(r)$

ad 1) $Y_l^m(\theta, \varphi) = \langle \vec{n}, l, m \rangle$

$$\implies \mathbf{L}_z |l, m\rangle = m\hbar |l, m\rangle \quad / \langle \vec{n} |$$

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial \Phi} Y_l^m(\theta, \varphi) = m \cdot \hbar Y_l^m(\theta, \varphi)$$

$$Y_l^m \sim e^{im\phi}$$

Vlastnosti: $\langle l', m' | l, m \rangle = \delta_{l'l} \delta_{m'm}$

$$\iff \int_{-1}^1 d(\cos \theta) \int_0^{2\pi} d\phi Y_l^{*m}(\theta, \varphi) Y_l^m = \delta_{l'l} \delta_{m'm}$$

tzn.: Y_l^l řeší rovnici

$$\mathbf{L}_+ |l, l\rangle = 0 \implies -i\hbar e^{i\phi} \left(i \frac{\partial}{\partial \theta} - \cotg \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) Y_l^l = 0$$

$$\implies Y_l^l = c_l \cdot e^{il\phi} \sin^l \theta; \quad c_l = \frac{(-1)^l}{2^l l!} \sqrt{\frac{(2l+1)(2l)!}{4\pi}}.$$

Obecně:

$$Y_l^m(\theta, \varphi) = (-1)^m \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \frac{(l-m)!}{(l+m)!} P_l^m(\cos \theta) e^{im\varphi}, \text{ kde}$$

P_l^m ... Legendreovy polynomy a platí

$$\frac{1}{\sqrt{1-2xt+t^2}} = \sum_l P_l(x)t^l ; P_l^m = (1-x^2)^{m/2} \frac{d^m}{dx^m} P_l$$

l – celočíselné, musí odrážet 2π periodicitu \mathbf{R}^3

ad 2) Radiální část řešení

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \left[\frac{2m}{\hbar^2} E + \frac{2m\bar{e}^2}{\hbar^2 r} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R_l = 0$$

hledáme vázaný stav $\int_0^\infty R_l R_l^* l dr = 1$ $E < 0!!$

$E > 0$... rozptylové stavy \sim jako volná částice

dominantní členy:

$r \rightarrow 0$ platí $R'' - l(l+1)/r^2 R \approx 0$

$\Rightarrow R \sim r^\alpha \rightarrow \alpha(\alpha-1) = l(l+1) \Rightarrow \alpha = l+1$

$r \rightarrow \infty$ platí $R'' + \frac{2m}{\hbar^2} E R \approx 0 ; \gamma^2 = -\frac{2m}{\hbar^2} E, E < 0$

$\Rightarrow R \sim e^{-\gamma r}$.

Hledáme řešení ve tvaru:

$$R_l(r) = r^{l+1} e^{-\gamma r} F(r)$$

necht' $z = 2\gamma r, k = \frac{m\bar{e}^2}{\gamma\hbar^2}$, pak

$$z \frac{d^2 F}{dz^2} + (2l+2-z) \frac{dF}{dz} - (l+1-k)F = 0. \quad (*)$$

Kummerova diferenciální rovnice:

Poznámka:

hypergeometrické funkce a Gaussova rovnice

$$z(1-z) \frac{d^2 \phi}{dz^2} + [c - (a+b-1)z] \frac{d\phi}{dz} - ab\phi = 0.$$

Hledáme řešení ve tvaru:

$$\phi = z^\sigma \sum_{\nu=0}^{\infty} c_\nu z^\nu$$

Rekurentní relace:

$$z(1-z)z^\sigma \sum_{\nu=0}^{\infty} c_\nu(\nu+\sigma)(\nu+\sigma-1)z^{\nu-2} + [c - (a+b-1)z]z^\sigma \sum_{\nu=0}^{\infty} c_\nu(\nu+\sigma)z^{\nu-1} - abz^\sigma \sum_{\nu=0}^{\infty} c_\nu \sigma^\nu = 0,$$

dále

$$c_0\sigma(c+\sigma-1)z^{\sigma-1} + \sum_{\nu=0}^{\infty} [c_{\nu+1}(\nu+\sigma+1)(\nu+c+\sigma) - c_\nu(\nu+a+\sigma)(\nu+b+\sigma)]z^{\nu+\sigma} = 0,$$

$$\sigma(c-1+\sigma) = 0 \quad \text{a také} \quad c_{\nu+1} = \frac{(\nu+a+\sigma)(\nu+b+\sigma)}{(\nu+1+\sigma)(\nu+c+\sigma)}.$$

Řešení:

$$\phi(z) = z^\sigma \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{(a+\sigma)_\nu (b+\sigma)_\nu}{(1+\sigma)_\nu (c+\sigma)_\nu} z^\nu, \text{ kde}$$

$(a)_\nu = a(a+1)\cdots(a+\nu-1) \quad \dots$ (Pochhammerův symbol);
 $\sigma \dots$ index řešení

1) $\sigma = 0$

$$\implies \phi_1(z) = {}_2F_1(a, b, c, z) = \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{(a)_\nu (b)_\nu}{(c)_\nu \nu!} z^\nu \quad \dots \quad \text{hypergeometrická řada}$$

2. řešení $\sigma = 1 - c \dots$

Degenerovaná hyperbolická funkce:

$$z = \frac{x}{b}$$

$$\implies x\left(1 - \frac{x}{b}\right) \frac{d^2\phi}{dx^2} + \left[c - (a-1)\frac{x}{b} - x \right] \frac{d\phi}{dx} - a\phi = 0,$$

necht' $b \rightarrow \infty$

$$\implies x\phi'' + (c-x)\phi' - a\phi = 0 \quad (\text{Kummer})$$

Řešení: $\phi(x) = {}_1F_1(a, c, x) = \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{(a)_{\nu} x^{\nu}}{(c)_{\nu} \nu!}$

Asymptotika: $\phi'' \sim \phi$, $\phi \sim e^x$ diverguje!

Řešení je polynomiální rozvoj \rightarrow pokud

$a = -n$ pak můžeme rozvoj useknout

$(a)_{\nu} = a(a+1) \cdots (a+\nu+1) \dots$ (Laguenovy polynomy)

Necht' $a = l+1-k$, $c = 2l+2$ (viz (*)), pak řešení můžeme hledat ve tvaru

$$F = c \cdot {}_1F_1(l+1-k, 2l+2, 2\gamma r)$$

Podmínka normovatelnosti:

$$l+1-k = -n_r, \quad n_r = 0, 1, \dots, \text{ tj. } k = n_r + l + 1 = n, \text{ kde}$$

$n \dots$ hlavní kvantové číslo, $n \in \{1, 2, \dots\}$

$$k = \frac{m\bar{e}^2}{\gamma\hbar^2}, \quad \gamma^2 = -\frac{2m}{\hbar^2}E$$

$$\implies E_n = -\frac{m\bar{e}^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2} = -\frac{1}{2} \frac{\bar{e}^2}{a_0 n^2}, \text{ kde}$$

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{m\bar{e}^2} \sim 0.5\text{\AA} \quad \text{Bohrův poloměr}$$

$$E_0 = -\frac{1\bar{e}^2}{2a_0} = -13.6\text{eV} \quad \dots \quad \text{vazebná energie atomu vodíku v základním stavu.}$$

Obecný tvar vlnové funkce:

$$\phi_{nlm}(r) = N_{nl} r^l e^{-\gamma_n r} {}_1F_1(-n_r, 2l+2, 2\gamma_n r) \cdot Y_l^m(\theta, \varphi).$$

Pro danou hladinu E_n existuje

$$\sum_{l=0}^{n-1} \sum_{m=-l}^l m = \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2 \text{ stavů}$$

Degenerace:

pravděpodobnost nalezení \bar{e} v dV

$$w_{nlm} = |\Psi_{nlm}|^2 r^2 d(\cos \theta) d\varphi dr.$$

atomy vodíkového typu ($\text{He}^+, \text{Li}^{++}, \dots$)

$\bar{e}^2 \rightarrow Z \cdot \bar{e}^2$, Z – počet protonů v jádře

Spektrum (emisní, absorpční):

$$\hbar\omega_{nm} = E_n - E_m = \frac{m\bar{e}^4}{2\hbar^3} \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$
$$V_{nm} = R \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad R = \frac{m\bar{e}^4}{4\pi\hbar^3} \approx 3 \cdot 10^{-15} \text{s}^{-1}$$

R ... Rydbergova konstanta

Přechody do $m = 1$... tzv. Lymanova serie

$m = 2, 3, 4$... Balmerova serie (viditelné spektrum), Ritzova - Paschenova, Bracketova serie)

$n \sim 100$ Rydbergovy atomy ($\sim 10^6 a_0$)

$E > 0$ ionizovaný atom

Matematický model struktury atomů vychází z aproximace nezávislých částic v centrálním poli

Elektrony jsou uspořádány v energetických slupkách charakterizovaných kvantovými čísly $\sim n, l$

Spektroskopické značení:

$$\begin{array}{cccccc} n & = & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & \dots \\ & & & & & K & L & M & N & O & \dots \end{array}$$

$$\begin{array}{cccccc} l & = & 0 & 1 & 2 & 3 & \dots \\ & & & & & s & p & d & f & \dots \end{array}$$

Elektronové konfigurace:

V prvním sloupci jsou periody Mendělejevovy tabulky.

Energetické hladiny atomů:

Atomy vodíkového typu, jemná struktura a LS interakce:

→ prvky alkalických kovů (Na, K,...)

$$\vec{E} = -\frac{1}{e} \text{grad } V_c(r), \quad \vec{B}_{ef} = -\frac{\vec{v}}{c^2} \times \vec{E}, \quad \vec{\mu} = \frac{e}{m_e} \cdot \vec{S}$$

$$\begin{aligned} M_{LS} &= -\mu B_{ef} = \mu \cdot (\vec{v} \times \vec{E}) \cdot \frac{1}{c^2} = \\ &= \left(\frac{e \cdot \vec{S}}{m_e c} \right) \left[\frac{\vec{p}}{m_e c} \times \frac{\vec{x}}{r} \frac{1}{-e} \frac{dV}{dr} \right] = \\ &= \frac{1}{m_e^2 c^2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} (\vec{L} \cdot \vec{S}) \quad \frac{1}{2} \text{ je pak v relativistické korekci} \end{aligned}$$

Dimenze:

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \right\rangle &\sim \frac{\bar{e}^2}{a_0 \cdot a_0^2}, \quad a_0 = \frac{\hbar^2}{m_e \bar{e}^2} \\ \langle M_{LS} \rangle &\sim \frac{\hbar^2}{m_e^2 c^2} \frac{\bar{e}^2}{a_0^3} \sim \lambda_c^2 \cdot \frac{\bar{e}^2}{a_0^3} \\ \langle M \rangle &\sim \frac{\bar{e}^2}{a_0}, \text{ pak } \frac{\langle M_{LS} \rangle}{\langle M \rangle} \sim \frac{\lambda_c^2}{a_0^2} \sim \alpha^2, \text{ kde} \end{aligned}$$

$$\alpha = \frac{\bar{e}^2}{\hbar c} = \frac{1}{137}$$

$$\sqrt{m^2 c^4 + p^2 c^2} \sim \frac{p^2}{2m} - \frac{p^4}{8m^3 c^2},$$

což je stejný řád jako relativistické efekty.

Typické rozměry atomu, elektronu a jádra:

- Bohrov poloměr, určuje typickou velikost atomu $a_0 = \frac{\lambda_c}{\alpha} \sim 0.5 \cdot 10^{-10} m$, kvantová mechanika
- Comptonova vlnová délka, určuje „velikost“ volného elektronu jako vlny $\lambda_c = \frac{h}{m_e c} \sim 3.8 \cdot 10^{-13} m$, kvantová elektrodynamika
- Klasický poloměr elektronu, charakterizuje elektron jako nabitou kuličkou vážící na sebe relativistickou energii $r_e = \frac{e^2}{m_e c^2} \approx 2 \cdot 10^{-15} m$, kvantová chromodynamika
- všechny tyto konstanty mikrosvěta jsou v poměru konstanty jemné struktury $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137}$, je bezrozměrná!!!

Symetrie v kvantové mechanice

Klasicky: $q_i \longrightarrow q_i + \delta q_i \quad \dots \quad L \text{ konst.}$

$$\frac{\partial L}{\partial q_i} = 0 \quad \Longrightarrow \quad \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \quad \left(\begin{array}{l} \text{Euler - Lagrange} \\ \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = \frac{\partial L}{\partial q_i} \end{array} \right)$$

$$\frac{d}{dt} p_i = 0 \quad \text{zákon zachování}$$

kvantová mechanika:

$$\mathbf{S} = \mathbf{1} - \frac{i\varepsilon}{\hbar} \mathbf{G}$$

\mathbf{S} ... operátor symetrie

\mathbf{G} ... generátor

Invariance vůči $\mathbf{S} \longrightarrow \mathbf{S}^+ \mathbf{H} \mathbf{S} = \mathbf{H}$

$$[\mathbf{G}, \mathbf{H}] = 0 \quad \longrightarrow \quad \frac{d\mathbf{G}}{dt} = 0 \quad (\text{Heisenberg})$$

Schrödingerův obraz:

$$|g', t, t_0\rangle = \mathbf{U}(t, t_0) |g'\rangle, \text{ pak} \\ \mathbf{G}(\mathbf{U} |g'\rangle) = \mathbf{UG} |g'\rangle = g' \mathbf{U}(t, t_0)$$

Degenerace $[\mathbf{U}, \mathbf{S}] = 0$,
jestliže $\mathbf{H} |n\rangle = E_n |n\rangle$, pak

$$\mathbf{H} \mathbf{S} |n\rangle = E_n (\mathbf{S} |n\rangle),$$

pokud $|n\rangle \neq \mathbf{S} |n\rangle \implies$ existuje degenerace.

Příklady: $[\vec{\mathbf{J}}, \mathbf{H}] = 0$ $[\mathbf{J}^2, \mathbf{H}] = 0$

\implies $(2j + 1)$ nezávislých stavů se stejnou energií

Operátor parity

\implies inverze souřadného systému

$$\vec{x} \longrightarrow -\vec{x}; |\alpha\rangle \longrightarrow \pi |\alpha\rangle, \\ \pi^+ \vec{x} \pi = -\vec{x}, \quad \pi \dots \text{unitární operátor}, \\ \mathbf{X}\pi + \pi\mathbf{X} = 0 \dots \text{antikomutuje.}$$

Nechť $\pi |x'\rangle = e^{i\delta} | -x'\rangle$, dále platí $\pi^2 |x'\rangle = |x'\rangle$

$$\implies e^{i\delta} = 1, \quad \pi^{-1} = \pi^+ = \pi, \quad \text{vlastní čísla } \pi \text{ jsou } \pm 1$$

$$\vec{\mathbf{p}} = \frac{d\vec{x}}{dt} \longrightarrow \{\pi, \vec{\mathbf{p}}\} \\ [\pi, \vec{\mathbf{L}}] = 0, \quad [\pi, \vec{\mathbf{J}}] = 0 \\ \vec{\mathbf{L}} = \vec{x} \times \vec{\mathbf{p}}; \quad \pi = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Vlastní stavy operátoru parity, \mathbf{L}^2 , \mathbf{L}

polární vektor $\pi^+ \vec{A} \pi = -\vec{A}$

axiální vektor $\boldsymbol{\pi}^+ \vec{A} \boldsymbol{\pi} = \vec{A}$ (tzv. pseudovektor),

analogicky pro skalár:

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\pi}^{-1} \vec{S} \cdot \vec{x} \boldsymbol{\pi} &= - \vec{S} \cdot \vec{x}, \text{ ale} \\ \boldsymbol{\pi}^{-1} \vec{L} \cdot \vec{S} \boldsymbol{\pi} &= \vec{L} \cdot \vec{S}\end{aligned}$$

Vlnová funkce a operátor parity:

$$\boldsymbol{\pi}|\alpha\rangle = \pm|\alpha\rangle \quad \longrightarrow \quad \Psi(-x') = \begin{cases} + \Psi(x') \\ - \Psi(x') \end{cases}.$$

Ne všechny stavy mají definovanou paritu! Např. $|p'\rangle$, ale

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\pi}|l, m\rangle &= (-1)^l |l, m\rangle \\ Y_l^m(-\vec{n}) &\longrightarrow (-1)^l Y_l^m(\vec{n}).\end{aligned}$$

Pokud $[\boldsymbol{\pi}, \mathbf{H}] = 0$, $|n\rangle \dots$ nedegenerované spektrum, pak $|n\rangle$ je vlastní stav $\boldsymbol{\pi}$.

Důkaz: $\frac{1}{2}(1 \pm \boldsymbol{\pi})|n\rangle = \pm|n\rangle$ je vlastní stav $\boldsymbol{\pi}$ a \mathbf{H}

Výběrová pravidla:

Nechť $\boldsymbol{\pi}|\alpha\rangle = \varepsilon_\alpha|\alpha\rangle$, $\boldsymbol{\pi}|\beta\rangle = \varepsilon_\beta|\beta\rangle$, pak $\langle\beta|x|\alpha\rangle = 0$, pokud $\varepsilon_\beta \neq -\varepsilon_\alpha$.

$$\langle\beta|x|\alpha\rangle = \langle\beta|\boldsymbol{\pi}^{-1}\boldsymbol{\pi}x\boldsymbol{\pi}^{-1}\boldsymbol{\pi}|\alpha\rangle = -\varepsilon_\beta\varepsilon_\alpha\langle\beta|x|\alpha\rangle.$$

Narušení parity při slabých interakcích:

\longrightarrow 1956 slabé interakce nejsou invariantní vůči $\boldsymbol{\pi}$

$$\begin{array}{ll} P \dots \boldsymbol{\pi} \vec{x} \rightarrow -\vec{x} \\ \text{CPT teorem} & T \dots \vec{t} \rightarrow -\vec{t} \\ & C \dots \text{nábojové združení} \end{array}$$

Lekce 9: Poruchová teorie

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_0 + \lambda \mathbf{V}$$

$$\begin{aligned} (\mathbf{H}_0 + \lambda \mathbf{V}) |n\rangle &= E_n |n\rangle, \quad \lambda \ll 1 \\ \mathbf{H}_0 |n^{(0)}\rangle &= E^{(0)} |n^{(0)}\rangle \end{aligned}$$

Poruchová (perturbační) teorie $\left\langle \begin{array}{l} \text{časově nezávislé } \mathbf{V} \\ \text{časově závislá porucha} \end{array} \right. \left\{ \begin{array}{l} \text{nedeg. spektrum} \\ \text{degen. spektrum} \end{array} \right.$

1) časově nezávislá porucha, nedegenerované spektrum $E_n^{(0)}$

$$\Delta n = E_n - E_n^{(0)}$$

$$(E_n^{(0)} - \mathbf{H}_0) |n\rangle = (\lambda \mathbf{V} - \Delta n) |n\rangle .$$

Pozor $\langle n^{(0)} | E_n^{(0)} - \mathbf{H}_0 | n^{(0)} \rangle = 0!$

Definujme projektor $\Phi_n = 1 - |n^{(0)}\rangle\langle n^{(0)}| = \sum_{k \neq n} |k^{(0)}\rangle\langle k^{(0)}|$, pak

$$\frac{1}{E_n^{(0)} - \mathbf{H}_0} \Phi_n = \sum_{k \neq n} (E_n^{(0)} - E_k^{(0)})^{-1} |k^{(0)}\rangle\langle k^{(0)}| .$$

Protože $\langle n^{(0)} | \lambda \mathbf{V} - \Delta n | n \rangle = 0$, platí

$$(\lambda \mathbf{V} - \Delta n) | n \rangle = \phi_n (\lambda \mathbf{V} - \Delta n) | n \rangle ,$$

$$| n \rangle = \underbrace{\frac{1}{E_n^{(0)} - \mathbf{H}_0} \phi_n (\lambda \mathbf{V} - \Delta n) | n \rangle}_{\text{inverze na prostoru}} + \underbrace{c_n | n^{(0)} \rangle}_{\text{homogenní řešení}} .$$

Iterační rovnice pro $| n \rangle$, volme normalizaci takto:

$$\langle n^{(0)} | n \rangle = 1 \quad \longrightarrow \quad c_n = 1$$

$$| n \rangle = | n^{(0)} \rangle + \frac{1}{E_n^{(0)} - \mathbf{H}_0} \phi_n (\lambda \mathbf{V} - \Delta n) | n \rangle$$

$$\text{a také} \quad \Delta_n = \lambda \langle n^{(0)} | \mathbf{V} | n \rangle .$$

Nechť

$$| n \rangle = | n^{(0)} \rangle + \lambda | n^{(1)} \rangle + \lambda^2 | n^{(2)} \rangle + \dots$$

$$\Delta_n = \lambda \Delta_n^{(1)} + \lambda^2 \Delta_n^{(2)} + \dots$$

a srovnáme členy podle λ^k

$$\Delta_n = E_n - E_n^{(0)} = \lambda V_{nn} + \lambda^2 \sum_{k \neq n} \frac{|V_{nk}|^2}{E_n - E_k^{(0)}}$$

$$| n \rangle = | n^{(0)} \rangle + \lambda \sum_{k \neq n} | k^{(0)} \rangle \frac{|V_{nk}|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} + \lambda^2 \sum_{k \neq n} \dots$$

Příklad: Kvadratický Starkův jev

Vodíkový atom ($n = 1$) v homogenním elektrickém poli.

$$\implies \quad \mathbf{H}_0 = \frac{\vec{\mathbf{p}}^2}{2m} + \mathbf{V}_0(r) , \quad \mathbf{V} = - e |E| \cdot z$$

$$\Delta_k = - e |E| z_{kk} + e^2 |E|^2 \sum_{j \neq k} \frac{|z_{kj}|^2}{E_k^{(0)} - E_j^{(0)}} , \text{ pak}$$

$k = 1$, což je jediná nedegenerovaná hladina,

$z_{kk} = 0$, což je důsledek výběrového pravidla pro operátor parity.

2) časově nezávislá perturbace: degenerované spektrum

$$\frac{V_{nk}}{\underbrace{E_n - E_k^{(0)}}_{\rightarrow 0}} \longrightarrow \text{diverguje} \implies V_{nk} = 0$$

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_0 + \lambda \mathbf{V}, \quad |m^{(0)}\rangle \dots \text{baze}$$

Degenerace hladiny E

$$\mathbf{H}_0 = \begin{matrix} m^{(0)} \\ m^{(1)} \\ \vdots \\ m^{(g)} \end{matrix} \begin{pmatrix} E & 0 & \dots & 0 \\ 0 & E & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & E \end{pmatrix} = E \cdot 1_g.$$

Pak $[\mathbf{H}_0, \mathbf{V}] = 0 \longrightarrow$ existuje společná baze $|l^{(1)}\rangle$ a platí

$$\Delta_l^{(1)} = \langle l^{(1)} | \mathbf{V} | l^{(1)} \rangle \quad \text{v nové bazi.}$$

Příklad: Lineární Starkův jev

Atom vodíku v homogenním elektrickém poli: Uvažujme částici s hlavním kvantovým číslem $n = 2 \implies 4 \times$ degenerovaná hladina

$$\implies (n, l, m) = \begin{matrix} (2, 0, 0); & (2, 1, -1); & (2, 1, 0), & (2, -1, 1) \\ \text{(2s)} & \text{(2p, m=-1)} & \text{(2p, m=0)} & \text{(2p, m=1)} \end{matrix}$$

jsou bazové vektory

$$\mathbf{V} = -e|E|z$$

Výběrová pravidla $\Delta m = 0, |\Delta l| = 1.$

Maticově:

$$\mathbf{V} = \begin{matrix} & 2s & 2p, m = 0 & 2p, m = -1 & 2p, m = 1 \\ \begin{pmatrix} 0 & \langle 2s | \mathbf{V} | 2p, 0 \rangle & 0 & 0 \\ \langle 2p, 0 | \mathbf{V} | 2s \rangle & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \end{matrix}$$

$$c = \langle 2s | \mathbf{V} | 2p, m = 0 \rangle = \langle 2p, m = 0 | \mathbf{V} | 2s \rangle = 3ea_0 | E |$$

$$\mathbf{V} = c \cdot \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Nová báze $|l^{(0)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|2s, m = 0\rangle \pm |2p, m = 0\rangle)$
 $\Delta^1 = 3ea_0 | E |$

4 × degenerace → 2 × degenerace + 2 × nedegenerované spektrum

Degenerované spektrum - formální matematické řešení

$|m^{(0)}\rangle \dots$ báze na podprostoru degenerovaných stavů (obecná)

$|l^{(0)}\rangle \dots$ vlastní stavy pro $\lambda \rightarrow 0$

$$|l^{(0)}\rangle = \sum \langle m^{(0)} | l^{(0)} \rangle |m^{(0)}\rangle$$

$$\begin{aligned} 0 &= (E - \mathbf{H}_0 - \lambda \mathbf{V}) |l\rangle = \\ &= (E - E_D^0 - \lambda \mathbf{V}) \mathbf{P}_0 |l\rangle + (E - \mathbf{H}_0 - \lambda \mathbf{V}) \mathbf{P}_1 |l\rangle \end{aligned}$$

$$\mathbf{P}_0 = |m^{(0)}\rangle \langle m^{(0)}| \quad ; \quad \mathbf{P}_1 = \mathbf{1} - \mathbf{P}_0.$$

Pak

$$(E - E_D^0 - \lambda \mathbf{P}_0 \mathbf{V}) \mathbf{P}_0 |l\rangle = \lambda \mathbf{P}_0 \mathbf{V} \mathbf{P}_1 |l\rangle, \quad (1)$$

$$-\lambda \mathbf{P}_1 \mathbf{V} \mathbf{P}_0 |l\rangle + (E - \mathbf{H}_0 - \lambda \mathbf{P}_1 \mathbf{V}) \mathbf{P}_1 |l\rangle = 0. \quad (2)$$

Z (2) na prostoru $\mathbf{P}_1 \mathcal{H}$

$$\mathbf{P}_1 |l\rangle = \mathbf{P}_1 \frac{\lambda}{E - \mathbf{H}_0 - \lambda \mathbf{P}_1 \mathbf{V}} \mathbf{P}_1 \mathbf{V} \mathbf{P}_0 |l\rangle.$$

Po dosazení do (1) dostaneme

$$(E - E_D^0 - \lambda \mathbf{P}_0 \mathbf{V} \mathbf{P}_0 - \lambda^2 \mathbf{P}_0 \mathbf{V} \mathbf{P}_0 - \lambda^2 \mathbf{P}_0 \mathbf{V} \mathbf{P}_1 \frac{1}{E - \mathbf{H}_0 - \lambda \mathbf{V}} \mathbf{P}_1 \mathbf{V} \mathbf{P}_0) \mathbf{P}_0 |l\rangle = 0$$

Příklad: $\vec{L}\vec{S}$ interakce

$$\mathbf{V} = \frac{1}{2m_0^2 c^2} \left\langle \frac{1}{r} \frac{dV_c}{dr} \right\rangle \vec{L}\vec{S}$$

baze L^2, S^2, J^2, J_z ; $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$

$$\Psi_{nlm} = R_{nl}(r) \cdot Y_l^{j=\frac{1}{2}, m} = l \pm \frac{1}{2}$$

$$\begin{aligned} \Delta_{n,l,j} = \langle \mathbf{V} \rangle &= \frac{1}{2m_e^2 c^2} \left\langle \frac{1}{r} \frac{dV_c}{dr} \right\rangle \frac{\hbar^2}{2} (j(j+1) - \\ &- l(l+1) - 3/4) = \frac{1}{2m_e^2 c^2} \left\langle \frac{1}{r} \frac{dV_c}{dr} \right\rangle \frac{\hbar^2}{2} \begin{pmatrix} l \\ -(l+1) \end{pmatrix}_{j=l-1/2}^{j=l+1/2}, \end{aligned}$$

protože $\vec{L}\vec{S} = \frac{1}{2} (\mathbf{J}^2 - \mathbf{L}^2 - \mathbf{S}^2)$

Příklad: Zeemanův efekt

→ Atom vodíku v homogenním magnetickém poli B

$$\vec{A} = -\frac{1}{2} (By; -Bx; 0)$$

$\vec{p} \rightarrow \vec{p} - e\vec{A}$

$$\begin{aligned} \mathbf{H} &= \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V_c(r) - \frac{e}{2m} (\vec{p}\vec{A} + \vec{A}\vec{p}) + \frac{e^2 A^2}{2m_e^2} = \\ &= \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V_c(r) - \frac{e}{2m} \underbrace{(\text{div } \vec{A})}_0 - \frac{e}{2m} \cdot 2 \cdot \frac{1}{2} B (-y\mathbf{p}_x + x\mathbf{p}_y) = \\ &= \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V_c(r) - \frac{e}{2m} \vec{B}\vec{L} \end{aligned}$$

Výsledný Hamiltonián (Pauli):

$$\mathbf{H} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V_c(r) - \underbrace{\frac{e}{2m}|B|}_{\omega_L} (L_z + 2S_z)$$

ω_L ... Larmorova frekvence

baze $\begin{pmatrix} \psi_{nlm} \\ 0 \end{pmatrix}$; $\begin{pmatrix} 0 \\ \psi_{nlm} \end{pmatrix}$

Energie: $E'_{nlm=E_{nlm}+\omega_L\hbar(m+1)}$
 $E''_{nlm=E_{nlm}+\omega_L\hbar(m-1)}$

Časově závislá poruchová teorie

$\mathbf{H} = \mathbf{H}_0 + V(t) \rightarrow$ nestacionární problem

$|\alpha\rangle = \sum c_n(0)|n\rangle \dots$ počáteční stav

$|\alpha, t\rangle = \sum c_n(t) e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} |n\rangle \dots$ časový vývoj

Volme reprezentaci:

$|\alpha, t\rangle_I = e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{H}_0 t} |\alpha, t_0, t\rangle_S \dots$ interakční (Diracova)

$$A_i = e^{i \frac{\mathbf{H}_0}{\hbar} t} A_S e^{-i \frac{\mathbf{H}_0}{\hbar} t}$$

Pak

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\alpha, t_0, t\rangle_S &= -\mathbf{H}_0 e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{H}_0 t} |\alpha, t_0, t\rangle_S + e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{H}_0 t} (\mathbf{H}_0 + V) |\alpha, t_0, t\rangle_S = \\ &= e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{H}_0 t} V e^{-\frac{i}{\hbar}\mathbf{H}_0 t} e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{H}_0 t} |\alpha, t_0, t\rangle_S = V_I |\alpha, t_0, t\rangle_S \end{aligned}$$

$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\alpha, t\rangle_I = V_I |\alpha, t\rangle_I$ Schrödingerova rovnice v Diracově reprezentaci

$$\begin{aligned} \langle n | \alpha, t_0, t \rangle &= c_n \quad ; \quad \omega_{nm} = \frac{E_m - E_n}{\hbar} \\ i\hbar \dot{c}_n &= \sum_m V_{nm} e^{i\omega_{nm} t} c_m \end{aligned}$$

$|n\rangle \dots$ stavy neporušeného Hamiltoniánu, $V_{nm} = \langle n|V_s|m\rangle$

Příklad: Přesné řešení pro 2-hladinový model

$$\mathbf{H}_0 = E_1|1\rangle\langle 1| + E_2|2\rangle\langle 2|,$$

$$V = \gamma e^{i\omega t} |1\rangle\langle 2| + \gamma e^{-i\omega t} |2\rangle\langle 1| ; \omega_{21} = \frac{E_2 - E_1}{\hbar}$$

$$i\hbar \begin{pmatrix} \dot{c}_1 \\ \dot{c}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \gamma e^{i(\omega - \omega_{21})t} \\ \gamma e^{-i(\omega - \omega_{21})t} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}$$

Volme $c_1(0) = 1 ; c_2(0) = 0$

$$|c_2(t)|^2 = \frac{\gamma^2/\hbar^2}{\Omega^2} \cdot \sin^2 \Omega t ; \Omega = \sqrt{\frac{\gamma^2}{\hbar^2} + \frac{(\omega - \omega_{21})^2}{4}}$$

(Rabiho relace) \longrightarrow rezonance při $\omega = \omega_{21} ; \Omega = \frac{\gamma}{\hbar}$

$\omega \dots$ frekvence potenciálu ,

$\omega_{21} \dots$ vnitřní frekvence přechodu

\longrightarrow cykly absorpce a emise:

$$|c_1(t)|^2 + |c_2(t)|^2 = 1$$

spinová magnetická rezonance

\longrightarrow spin 1/2 v magnetickém poli

$$\vec{B} = B_0\vec{z} + B_1(\vec{x} \cos \omega t + \vec{y} \sin \omega t)$$

$$\mathbf{H}_0 = -\frac{e\hbar B_0}{2m_e} (|+\rangle\langle +| - |-\rangle\langle -|)$$

$$V(t) = -\frac{e\hbar B_1}{2m_e} [\cos \omega t (|+\rangle\langle -| + |-\rangle\langle +|) + \sin \omega t (-i|+\rangle\langle -| + i|-\rangle\langle +|)]$$

$\omega_{21} = \frac{|e|B_0}{m_e} \dots$ frekvence spinové precese

$$\begin{aligned} |+\rangle &= |2\rangle \\ |-\rangle &= |1\rangle \end{aligned} \quad ; \quad \frac{|e|\hbar B_1}{2m_e} = \gamma$$

Fyzikální interpretace:

$$2B_1\vec{x} \cos \omega t = B_1(\vec{x} \cos \omega t + \vec{y} \sin \omega t) + B_1(\vec{x} \cos \omega t - \vec{y} \sin \omega t)$$

Maser: Microwave Amplification by Stimulated Emission of Radiation

→ medium - čpavek NH_3

Zjednodušený model - částice v dvojité jámě:

$$\left. \begin{aligned} &\rightarrow \text{symetrické řešení } |s\rangle \\ &\rightarrow \text{asymetrické řešení } |a\rangle \end{aligned} \right\} E_a > E_s$$

$[\mathbf{H}, \boldsymbol{\pi}] = 0 \quad \rightarrow |s\rangle, |a\rangle$ mají paritu \pm

$$|R\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|s\rangle + |a\rangle) \quad ; \quad |L\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|s\rangle - |a\rangle)$$

nejsou stacionární stavy!!!

$$|R, t\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-i\frac{E_s}{\hbar}t} \left(|s\rangle + e^{-i\frac{E_a-E_s}{\hbar}t} |a\rangle \right)$$

- oscilace = tunelový jev mezi jámami
- nekonečně hluboké jámy \Rightarrow degenerace
- $|R\rangle, |L\rangle$ jsou stacionární stavy, ale nejsou vlastní stavy operátoru $\boldsymbol{\pi} \implies$ narušení symetrie

Přibližné řešení ve formě perturbací řady

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\alpha, t\rangle_I &= V_I |\alpha, t\rangle_I \\ |\alpha, t\rangle &= U_I |\alpha, t_0\rangle \end{aligned}$$

$$U_I(t, t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t V_I(t') U(t', t_0) dt' = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t V_I(t') dt' + \\ + \left(\frac{-i}{\hbar} \right)^2 \int_{t_0}^t V_I(t') dt' + \dots \quad (\text{Dysonova řada})$$

$|i\rangle \dots$ počáteční stav , $\langle n|U(t, t_0)|i\rangle = c_n$.

Pak

$$c_n^0 = \langle n|i\rangle = \delta_{ni} \\ c_n^1 = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t \langle n|V_I|i\rangle dt' \\ \vdots \\ P_{(i \rightarrow n)} = |c_n^0 + c_n^1 + \dots|^2$$

Model - po částech konstantní potenciál

$$c_n^0 = \delta_{ni} ; c_n^1 = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t e^{i\omega_{ni}t'} dt' \cdot V_{ni} = \frac{i}{\hbar} V_{ni} \frac{1 - e^{i\omega_{ni}t}}{i\omega_{ni}} \\ |c_n^1|^2 = \frac{4|V_{ni}|^2}{(E_n - E_i)^2} \sin^2 \frac{\omega_{ni}t}{2}$$

spojitá reprezentace $i \rightarrow n$, $E_i \sim E_n$

$$P_{i \rightarrow n} = \sum_{\substack{n \\ E_i \sim E_n}} |c_n^1|^2 \longrightarrow \int dE \rho(E) |c_n(E)|^2 = \\ = 4 \int \sin^2 \left(\frac{E_i - E_n}{2\hbar} t \right) \frac{|V_{ni}|^2}{(E_n - E_i)^2} \rho(E_n) dE_n \quad (*)$$

$\lim_{\alpha \rightarrow \infty} \frac{1}{\pi} \frac{\sin^2 \alpha x}{\alpha x^2} = \delta(x)$ vede ve vztahu (*) na

$$\frac{2\pi}{\hbar} t |V_{ni}|^2 \rho(E) \\ w_{i \rightarrow n} = \frac{P}{t} = \frac{2\pi i}{\hbar} |V_{ni}|^2 \rho(E) \Big|_{E_n = E_i}$$

\dots časová hustota pravděpodobnosti přechodu z $i \rightarrow n$

$$w = \frac{2\pi i}{\hbar} |V_{ni}|^2 \delta(E_n - E_i) \dots \text{Fermiho zlaté pravidlo}$$

Harmonická porucha:

$$V(t) = V \cdot e^{i\omega t} + V^* \cdot e^{-i\omega t} ; V = V(\vec{x})$$

$$c_n^1 = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t V(t') e^{i\omega_{ni}t'} dt' = \\ = \frac{1}{\hbar} \left[V_{ni} \frac{1 - e^{i(\omega + \omega_{ni})t}}{\omega + \omega_{ni}} + V^* \frac{1 - e^{i(\omega_{ni} + \omega)t}}{\omega_{ni} + \omega} \right] ,$$

což vede na

$$w_{ni} = \frac{2\pi i}{\hbar} |V_{ni}|^2 \delta(E_n = E_i \pm \hbar\omega)$$

$$\Rightarrow \begin{aligned} w_{ni} &= \frac{2\pi}{\hbar} |V_{ni}|^2 g(E_n = E_i + \hbar\omega) \dots \text{absorbce} \\ w_{ni} &= \frac{2\pi}{\hbar} |V_{ni}|^2 g(E_n = E_i - \hbar\omega) \dots \text{emise} \end{aligned}$$

$$\longrightarrow \frac{w_{ni}(\text{absorbce})}{g(\text{horní hladina})} = \frac{w_{ni}(\text{emise})}{g(\text{dolní hladina})}$$

(Podmínka rovnováhy \rightarrow viz záření abs. č. tělesa)

Interakce klasického elektromagnetického pole s elektronem

$$\mathbf{H} = \frac{\vec{\mathbf{p}}^2}{2m} + e\phi - \frac{e}{m_e} \vec{\mathbf{A}} \cdot \vec{\mathbf{p}} \quad , \quad \text{div } \vec{\mathbf{A}} = 0$$

Elmag. pole \rightarrow polarizovaná vlna

$$\vec{\mathbf{A}} = 2A_0 \vec{\epsilon} \cos\left(\frac{\omega}{c} \vec{n} \cdot \vec{x} - \omega t\right)$$

Pak

$$\vec{A}\vec{p} = A_0(\vec{\epsilon} \vec{p}) \left[e^{i\vec{k}\vec{x} - i\omega t} + \text{komplex. sdruž.} \right] , \\ V = -\frac{e}{m} A_0(\vec{\epsilon} \vec{p}) e^{i\frac{\omega}{c} \vec{n} \cdot \vec{x}} \dots \text{porucha}$$

$$w_{i \rightarrow n} = \frac{2\pi}{\hbar} \left(\frac{e}{m}\right)^2 |A_0|^2 |\langle n | e^{i\frac{\omega}{c} n \vec{e}_k \vec{x}} \vec{\varepsilon} \vec{p} | i \rangle|^2 \cdot \delta(E_n - E_i - \hbar\omega)$$

→ proces absorpcie energie (nepružný rozptyl)

Účinný průřez:

$$\sigma = \frac{\text{energie absorbování/jednotku času}}{\text{tok energie}}$$

tok energie = energie/(jednotka času)(jednotka plochy)

$$\begin{aligned} \sigma &= \frac{\hbar\omega \cdot \left(\frac{2\pi}{\hbar}\right) \frac{e^2}{m_e^2} |\langle n | e^{i\vec{k}\vec{x}} \vec{\varepsilon} \vec{p} | i \rangle|^2 |A_0|^2 \cdot \delta(E_n - E_i - \hbar\omega)}{\frac{1}{2\pi} c \varepsilon \omega^2 |A_0|^2} = \\ &= \frac{4\pi^2 \hbar}{m_e^2 \omega} \left(\frac{e^2}{\hbar c}\right) |\langle n | e^{i\vec{k}\vec{x}} \vec{\varepsilon} \vec{p} | i \rangle|^2 |A_0|^2 \delta(E_n - E_i - \hbar\omega) \end{aligned}$$

Fotoefekt - přechod elektronu \bar{e} od vázaného k volnému stavu

$|i\rangle$... vázaný stav $\left(\sim e^{-zr/a_0} \left(\frac{z}{a_0}\right)^{3/2} \right)$

$|n\rangle$... $|k_f\rangle$... volný elektron

$$\langle x | k_f \rangle = \frac{e^{i\vec{k}_f \vec{x}}}{L^{3/2}}, \quad k_x = \frac{2\pi n x}{L}$$

Existuje celkem $n^2 d\Omega \frac{dn}{dE} dE = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 \frac{m_e}{\hbar^2} k_f dE d\Omega$ stavů

s energií $E = \frac{k^2 \hbar^2}{2m_e}$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \Big|_{\text{fotoefekt}} = \frac{4\pi^2 d \hbar}{m_e^2 \omega} |\langle \vec{k}_f | e^{i\frac{\omega}{c} (\vec{n}\vec{x})} \vec{\varepsilon} \vec{p} | i \rangle|^2 \cdot \frac{m_e k_f L^3}{\hbar^2 (2\pi)^3}$$

Fotoefekt pro atomy vodíkového typu:

$$\rightarrow \frac{d\sigma}{d\Omega} = 32e^2 k_f \frac{(\vec{\varepsilon} \vec{k}_f)^2}{m c \omega} \frac{z^5}{a_0^5} \frac{1}{\left[\left(\frac{z^2}{a_0^2}\right)^2 + q^2 \right]^4}, \quad \vec{q} = \vec{k}_f - \frac{\omega}{c} \vec{n}$$

Výpočet maticového elementu:

$$\begin{aligned} \langle \vec{k}_f | e^{i\frac{\omega}{c}(\vec{n}\vec{x})} \vec{\varepsilon} \vec{p} | i \rangle &= \vec{\varepsilon} \int d^3x \frac{e^{-i\vec{k}_f\vec{x}}}{L^{3/2}} \cdot e^{i\frac{\omega}{c}(\vec{n}\vec{x})} (-i\hbar\vec{\nabla}) e^{-z\frac{r}{a_0}} \left(\frac{z}{a_0} \right)^{3/2} = \\ &= -\vec{\varepsilon} \int d^3x (-i\hbar\vec{\nabla}) \left[\frac{e^{-i\vec{k}_f\vec{x}}}{L^{3/2}} e^{i\frac{\omega}{c}\vec{n}\vec{x}} \right] e^{-z\frac{r}{a_0}} \left(\frac{z}{a_0} \right)^{3/2}, \end{aligned}$$

protože $\vec{\varepsilon} \vec{\nabla} (e^{i\frac{\omega}{c}\vec{n}\vec{x}}) = 0$ [transverzalita $\vec{\varepsilon}\vec{n} = 0$], pak

$$\langle \vec{k}_f | e^{i\frac{\omega}{c}(\vec{n}\vec{x})} \vec{\varepsilon} \vec{p} | i \rangle = (\vec{\varepsilon}\vec{k}_f) \frac{1}{L^{3/2}} \left(\frac{z}{a_0} \right)^{3/2} \int d^3x e^{-\frac{r}{a_0}z - i\vec{q}\vec{x}}, \quad \vec{q} = \vec{k}_f - \frac{\omega}{c}\vec{n}$$

Lekce 10: Identické částice

Nerozlišitelnost \equiv nemožnost obarvit různé dvě částice, tj. není možné rozlišit víc než vlastnosti popsané úplnou množinou komutujících operátorů.

Nemožnost rozlišit trajektorie

→ superpozice → interference

$$|k'\rangle_{(1)}|k''\rangle_{(2)} \quad \text{nebo} \quad |k''\rangle_{(1)}|k'\rangle_{(2)} \quad ?$$

částice jsou nerozlišitelné, ale ket-vektory $|k'\rangle$, $|k''\rangle$ ano a platí

$$\langle k'|k''\rangle = \delta_{k'k''}$$

Obecná superpozice:

$$|\Psi\rangle = c_1|k'\rangle|k''\rangle + c_2|k''\rangle|k'\rangle$$

Výměnná degenerace - stav není určen!

Řešení: → symetrie (antisymetrie) stavu

Operátor permutace:

$$\mathbf{P}_{12} |k'\rangle|k''\rangle = |k''\rangle|k'\rangle \quad \dots \quad \text{záměna (1) za (2)}$$

$$\mathbf{P}_{12} = \mathbf{P}_{21}, \quad \mathbf{P}_{12}^2 = \mathbf{1}, \quad \text{vlastní hodnoty jsou } \pm 1$$

Aplikace na spin $S^{(1)}, S^{(2)}$

Pozorovatelé $\mathbf{A}_1, \mathbf{A}_2$

$$\mathbf{A}_1 |a'\rangle|a''\rangle = a'|a'\rangle|a''\rangle$$

$$\mathbf{A}_2 |a'\rangle|a''\rangle = a''|a'\rangle|a''\rangle$$

Pak

$$\begin{aligned} \mathbf{P}_{12}\mathbf{A}_1 |a'\rangle|a''\rangle &= a'|a'\rangle|a''\rangle \\ \iff \mathbf{P}_{12}\mathbf{A}_1\mathbf{P}_{12}^{-1}\mathbf{P}_{12} |a'\rangle|a''\rangle &= \underbrace{\mathbf{P}_{12}\mathbf{A}_1\mathbf{P}_{12}^{-1}}_{\mathbf{A}_2} |a''\rangle|a'\rangle \end{aligned}$$

Hamiltonián dvou identických částic

$$\mathbf{H} = \frac{\mathbf{p}_1^2}{2m} + \frac{\mathbf{p}_2^2}{2m} + V_{12}(|x_1 - x_2\rangle) + V(x_1) + V(x_2)$$

$[\mathbf{H}, \mathbf{P}_{12}] = 0 \Rightarrow \mathbf{P}_{12}\mathbf{H}\mathbf{P}_{12}^{-1} = \mathbf{H}$, \mathbf{P}_{12} je integál pohybu
 $+1 \dots$ symetrické stavy; $-1 \dots$ antisymetrické stavy

$$|k', k''\rangle_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|k'\rangle|k''\rangle \pm |k''\rangle|k'\rangle)$$

$$\mathbf{S}_{12} = \frac{1}{2}(1 + \mathbf{P}_{12}), \text{ resp. } \mathbf{A}_{12} = \frac{1}{2}(1 - \mathbf{P}_{12})$$

\dots projektory do symetrick., resp. antisymetrického podprostoru

Rozšíření na mnoho identických částic:

Operátor permutace $\mathbf{P}_{ij} |k^1, \dots, k^i \dots k^j, \dots\rangle = |k^1, \dots, k^j \dots k^i, \dots\rangle$

$$\mathbf{P}_{ij} = \mathbf{1}, \text{ ale } [\mathbf{P}_{ij}, \mathbf{P}_{kl}] \neq 0 \text{ obecně}$$

Příklad \rightarrow 3 identické částice

$|k'\rangle|k''\rangle|k'''\rangle$ celkem 3! permutací ($k' \neq k'' \neq k'''$)

$$\begin{aligned} |k', k'', k'''\rangle_{\pm} &= \frac{1}{\sqrt{6}} [|k'\rangle|k''\rangle|k'''\rangle \pm |k''\rangle|k'\rangle|k'''\rangle + \\ &+ |k''\rangle|k'''\rangle|k'\rangle \pm |k'''\rangle|k'\rangle|k''\rangle \pm |k'\rangle|k''\rangle|k'''\rangle \pm |k'\rangle|k'''\rangle|k''\rangle] \end{aligned}$$

4 stavy \dots smíšená statistika

Spin a statistika:

- systém N identických částic je popsán **symetrickou** vlnovou funkcí, pokud mají celočíselný spin (Bosony) nebo **antisymetrickou**, pokud spin

je poločíselný (Fermiony)

$$\mathbf{P}_{ij} |N \text{ identických bosonů} \rangle = + |N \text{ bosonů} \rangle$$

$$\mathbf{P}_{ij} |N \text{ identických fermionů} \rangle = - |N \text{ fermionů} \rangle$$

Fermiony \rightarrow Pauliho vylučovací princip \Rightarrow 2 fermiony nemohou být ve stejném stavu.

Porovnání pro 2 částice ve stavech $|k'\rangle$, $|k''\rangle$:

$$\text{Fermiony: } \frac{1}{\sqrt{2}} (|k'\rangle|k''\rangle - |k''\rangle|k'\rangle)$$

$$\text{Bosony: } |k'\rangle|k'\rangle ; |k''\rangle|k''\rangle ; \frac{1}{\sqrt{2}} (|k'\rangle|k''\rangle + |k''\rangle|k'\rangle)$$

Klasické chování (Maxwell - Boltzman):

$$|k'\rangle|k''\rangle ; |k''\rangle|k'\rangle$$

$$|k'\rangle|k'\rangle ; |k''\rangle|k''\rangle$$

kdy mohou být částice ve stejném stavu?

$$F(0) ; B(2/3)$$

Klasické pravděpodobnost: $(2/4 = 1/2)$

Důsledek: - pro $T \rightarrow 0$ bosony tvoří tzv. Bose - Einsteinovu kondenzaci

Příklad: 2-elektronový systém

\rightarrow antisymetrická vlnová funkce $\Psi(x, \xi)$, kde

x ... prostorová část ξ ... spinová část

Obecně:

$$\Psi_{12} = \sum_{m_{s_1}} \sum_{m_{s_2}} c(m_{s_1}, m_{s_2}) \langle x_1, m_{s_1}, x_2, m_{s_2} | \alpha \rangle$$

Nechť $[\mathbf{H}, \mathbf{S}_{\text{tot}}^2] = 0$; $[\mathbf{H}, \mathbf{S}_z] = 0$, pak

$$\Psi_{12} = \Phi(x_1, x_2) \chi_{12}$$

Baze pro spinovou část:

$$\chi_{12}(m_{s_1}, m_{s_2}) = \left\{ \begin{array}{l} \chi_{++} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} (\chi_{+-} + \chi_{-+}) \\ \chi_{--} \end{array} \right\} \quad \text{triplet } l = 1, m = \pm 1, 0$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{\sqrt{2}} (\chi_{+-} - \chi_{-+}) \\ \chi_{--} \end{array} \right\} \quad \text{singlet } l = 0, m = 0$$

Antisymetrie vlnové funkce:

$$\langle x_1, m_{s_1}, x_2, m_{s_2} | \mathbf{P}_{12} | \alpha \rangle = - \langle x_1, m_{s_1}, x_2, m_{s_2} | \alpha \rangle$$

$$\mathbf{P}_{12} = \mathbf{P}_{12}^{\text{prostor}} \mathbf{P}_{12}^{\text{spin}}$$

Cvičení: $\mathbf{P}_{12}^{\text{spin}} = \frac{1}{2} \left(\mathbf{1} + \frac{4}{\hbar^2} \mathbf{S}^{(1)} \cdot \mathbf{S}^{(2)} \right) = \begin{cases} +1 & \text{triplet} \\ -1 & \text{singlet} \end{cases}$

Pak

$$\Psi(x_1, x_2) \text{ symetrické} \Rightarrow \chi \text{ antisymetrické}$$

$$\Psi(x_1, x_2) \text{ antisymetrické} \Rightarrow \chi \text{ symetrické}$$

Důsledek pro řešení Schrödingerovy rovnice:

$$\mathbf{H} = \frac{\mathbf{p}_1^2}{2m} + \frac{\mathbf{p}_2^2}{2m} + V(x_1) + V(x_2), \quad V(x_{12}) \text{ zanedbáno}$$

$$\rightarrow [\mathbf{H}, \mathbf{S}_{\text{rot}}^2] = [\mathbf{H}, \mathbf{S}_z] = 0$$

$\mathbf{H}\Psi = E\Psi$ lze řešit jako

$$\Psi = \omega_A(x_1) \omega_B(x_2) \cdot \chi; \quad \text{symetrizace} \Rightarrow \Psi = \Phi(x_1, x_2) \chi$$

$$\Phi(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\omega_A(x_1) \omega_B(x_2)) \pm \omega_A(x_2) \omega_B(x_1), \quad \text{kde}$$

$\omega_{A,B} \dots$ jednočásticová řešení

$$p_{12} = \frac{1}{2} [|\omega_A(x_1)|^2 |\omega_B(x_2)|^2 + |\omega_A(x_2)|^2 |\omega_B(x_1)|^2 \pm \underbrace{2 \text{Re}(\omega_A(x_1) \omega_B(x_2) \omega_A^*(x_1) \omega_B^*(x_2))}_{\text{výměnná hustota}} d^3x_1 d^3x_2]$$

$\chi \dots$ triplet $\Rightarrow p(x, x) = 0$

Vliv klasické separace:

$\omega_A(x_1) \neq 0$ a $\omega_B(x_2) \neq 0 \rightarrow p_{12} = \frac{1}{2} |\omega_A(x_1)|^2 |\omega_B(x_2)|^2 \rightarrow$

\rightarrow klasická faktorizace

jestliže se vlnové funkce nepřekrývají \rightarrow netřeba symetrizovat

Reprezentace obsazovacích čísel:

N identických částic

vektor

$$|\{x^1, \xi^1, \dots, x^N, \xi^N\}\rangle = |x^1, \xi^1\rangle \dots |x^N, \xi^N\rangle$$

\rightarrow lze rozlišit 1., 2., atd. index, nikoli částici!

Bosony $|x^1, \xi^1, \dots, S\rangle = (N!)^{1/2} \hat{S} |x^1, \xi^1, \dots, x^N, \xi^N\rangle$

$S = \frac{1}{N!} \sum_{j=1}^{N!} P_j \dots$ součet přes všechny permutace

$A = \frac{1}{N!} \sum_{j=1}^{N!} \varepsilon_j P_j \dots$ antisymetrický projektor

Rozvoj vlnové funkce:

$$|\Psi, S\rangle = \frac{1}{N!^{1/2}} \int d^3x^1 \dots d^3x^N \sum_{\xi} \Psi(x^i, \xi^i, S) \cdot |x^1, \xi^1, \dots, x^N, \xi^N, S\rangle$$

Porovnat s N -dimenzionální vlnovou funkcí podobných částic:

$$|\Psi\rangle = \int d^3x^1 \dots d^3x^N \sum_{\xi} \Psi(\{x^i, \xi^i\}) |x^1, \xi^1, \dots, x^N, \xi^N, S\rangle$$

$|(\{x, \xi\})|^2 \dots$ pravděpodobnost nalezení 1., 2., \dots indexované částice

$|\Psi(\{x, \xi\}, S)|^2 \dots$ pravděpodobnost nalezení jedné permutace

\rightarrow realizuje se skutečnost, kdy pořadí rozhoduje vs. kdy pořadí nerozhoduje

Např. analogicky např. u antisymetické vlnové funkci pro fermiony. . . změna znaménka při permutaci

jiná reprezentace (obsazovací čísla)

$$|c_{n_1}^{(1)}\rangle |c_{n_2}^{(2)}\rangle \dots |c_{n_N}^{(N)}\rangle$$

- každé $|c_j^{(i)}\rangle$ probíhá celé spektrum
- ve vektoru se číslo $c^{(1)}$ objeví N_1 -krát, $c^{(2)}$ se objeví N_2 -krát, atd.

$$\sum_i N_i = N, \quad N_i \geq 0$$

\Rightarrow celkem $\frac{N!}{N_1! \dots N_m! \dots}$ kombinací, tj. vektorů,
které generují podprostor $\mathcal{H}(N_1, N_2, \dots, N_m, \dots)$ a platí

$$\mathcal{H} = \sum_{N_1+N_2+\dots+N_m=N} \mathcal{H}'(N_1, N_2, \dots), \quad N_i \dots \text{obsazovací čísla}$$

$$|N_1, N_2, \dots, S\rangle = \left(\frac{N!}{N_1! \dots N_m! \dots} \right) \hat{S} |c_{n_1}^{(1)}\rangle |c_{n_2}^{(2)}\rangle \dots$$

$$|N_1, N_2, \dots, A\rangle = (N)^{1/2} \hat{A} |c_{n_1}^{(1)}\rangle |c_{n_2}^{(2)}\rangle \dots$$

N částicové stavy identických (nerozlišitelných) částic s definovanou symetrií(antisymetrií)

Efektivní popis \equiv druhé kvantování

\rightarrow popis stavů na \mathcal{H}_S (N částicové symetrické stavy).

Nechť

$$|N_1 = 0, N_2 = 0, \dots, N_n = 1, N_{n+1} = 0, \dots\rangle = |c_n\rangle, \text{ kde}$$

$|c_n\rangle \dots$ stavy jedné částice

$$\left. \begin{aligned} |1, 0, 0, \dots, S, N = 1\rangle &= |c_1\rangle \\ |0, 1, 0, \dots, S, N = 1\rangle &= |c_2\rangle \end{aligned} \right\} \text{ \u010dti jedna \u010d\u00e1stice je ve stavu } c_1, \text{ resp. } c_2$$

$$|0, 0, 0, \dots, S, N = 0\rangle = |0\rangle \quad \text{\u017e\u00e1dn\u00e1 \u010d\u00e1stice}$$

Definujme krea\u010dn\u00ed oper\u00e1tor:

$$\hat{\mathbf{a}}_k^\dagger |N_1, N_2, \dots, N_k, \dots, S, N\rangle = (N + 1)^{1/2} |N_1, N_2, \dots, N_k + 1\rangle$$

$$[\hat{\mathbf{a}}_k^\dagger, \hat{\mathbf{a}}_j^\dagger] = 0$$

anihila\u010dn\u00ed oper\u00e1tor:

$$\hat{\mathbf{a}}_k |N_1, N_2, \dots, N_k, \dots, S, N\rangle = (N)^{1/2} |N_1, N_2, \dots, N_k - 1, \dots, S, N - 1\rangle$$

Pak

$$|N_1, N_2, \dots, N_k, \dots, S, N\rangle = \frac{\hat{\mathbf{a}}_1^{\dagger N_1} \dots \hat{\mathbf{a}}_k^{\dagger N_k}}{(N_1!)^{1/2} \dots (N_k!)^{1/2}} |0\rangle$$

$$[\hat{\mathbf{a}}_j, \hat{\mathbf{a}}_k^\dagger] = \delta_{jk}$$

P\u0159echod mezi bazemi: $|c\rangle \rightarrow |b\rangle$

$$|b\rangle = \sum_m \langle c_m | b_n \rangle |c_m\rangle$$

$$\hat{\mathbf{a}}^\dagger(b_n) = \sum_m \langle c_m | b_n \rangle \hat{\mathbf{a}}^\dagger(c_m) \quad \text{vztah mezi krea\u010dn\u00edmi oper\u00e1tory}$$

Form\u00e1ln\u00ed analogie s tvarem vlnov\u00e9 funkce v $|x, \xi\rangle$ reprezentaci

$$\Psi(x, \xi) = \langle x, \xi | \Psi \rangle = \sum_j \langle x, \xi | c_j \rangle \underbrace{\langle c_j | \Psi \rangle}_{\Psi(c_j)}$$

a transformac\u00ed anihila\u010dn\u00edch oper\u00e1tor\u016f

$$\Psi(x, \xi) \rightarrow \hat{\mathbf{a}}'(x) ; \Psi(c_j) \rightarrow \hat{\mathbf{a}},$$

$$\Psi(x, \xi) = \sum_j \langle x, \xi | c_j \rangle \mathbf{a}(c_j).$$

\u2192 "Kvantov\u00e1n\u00ed" vlnov\u00e9 funkce spo\u010d\u00edv\u00e1 v tom, \u017e\u00e9 j\u00ed p\u0159\u00edrazujeme oper\u00e1torov\u00fd charakter. Popisuje mnoha\u010d\u00e1sticov\u00e9 syst\u00e9my identick\u00fdch \u010d\u00e1stic).

Analogicky fermionům se přiřazuje komutátor, resp. antikomutátor.

Užití druhého kvantování:

→ kvantování pole

Elektromagnetické pole = bosonovské pole

$\vec{A}(x, t)$... vektorový potenciál

$$\vec{A}(x, t) = \sum_{\lambda=1}^2 \int d^3k \vec{A}_{k,\lambda}(x, t) \dots \text{spektrální rozvoj}$$

$$\begin{aligned} \vec{A}_{k,\lambda}(x, t) &= \vec{\epsilon}(k, \lambda) [A(k, \lambda) \exp(i\vec{k}\vec{x} - i\omega t) + \exp(-i\vec{k}\vec{x} + i\omega t)] \\ \vec{\epsilon}(k, \lambda) \vec{\epsilon}(k, \lambda') &= \delta_{\lambda\lambda'} ; \vec{\epsilon}\vec{k} = 0 \end{aligned}$$

Nechť $k_i^{(n)} = \frac{2\pi}{a_i} n$; $n = 0, 1, \dots$ "kvantování"

Diskretizace:

$$\vec{A}(x, t) = \sum_{\lambda=1}^2 \sum_k \vec{A}_{k,\lambda}(x, t)$$

$\mathcal{E} = \frac{\epsilon_0}{2} \int_V d^3x (E^2 + c^2 B^2)$, pak ze vztahu pro diskretizací obržíme

$$\mathcal{E} = 2\epsilon_0 V c^2 \sum_{\lambda=1}^2 \sum_k k^2 A(x, t) A^*(x, t)$$

Nechť $\vec{q} = \hbar\vec{k}$, $E = \hbar\omega = cq$, kde

\vec{q} ... impuls , \vec{k} ... vlnový vektor Pak

$$\mathcal{E} \rightarrow \hat{\mathbf{H}}$$

$$\vec{A}(\vec{k}, \lambda) \rightarrow \frac{\hbar}{(2\epsilon_0 c V q)^{1/2}} \hat{\mathbf{A}}(\vec{q}, \lambda)$$

Tedy

$$\hat{\mathbf{H}} = \sum_{\lambda=1}^2 \sum_k cq \hat{\mathbf{A}}^\dagger(\vec{q}, \lambda) \hat{\mathbf{A}}(\vec{q}, \lambda)$$

⇒ elmag. pole se chová jako systém oscilátorů rozlišených polarizací a vlnovým vektorem (frekvencí).

Přechod ke spojitému rozdělení:

$$\hat{\mathbf{a}}(q, \lambda) = \lim_{V \rightarrow \infty} \frac{\text{hat} \mathbf{A}(\vec{q}, \lambda)}{(\Delta q)^{1/2}}$$

$$\Delta q = \frac{(2\pi\hbar)^3}{V} ; \Delta q_i = \frac{2\pi\hbar}{a_i} \rightarrow 0$$

pak

$$[\hat{\mathbf{a}}(q, \lambda), \hat{\mathbf{a}}'(q', \lambda')] = 0$$

$$[\hat{\mathbf{a}}(q, \lambda), \hat{\mathbf{a}}^\dagger(q', \lambda')] = \delta_{\lambda\lambda'} \delta(\vec{q} - \vec{q}')$$

$$\hat{\mathbf{A}}(x) = \frac{1}{4\pi} \frac{1}{(\pi c \varepsilon \hbar)^{1/2}} \sum_{\lambda=1}^2 \int \frac{d^3 q}{q^{1/2}} \vec{\varepsilon}(q, \lambda) [\hat{\mathbf{a}}_0 e^{i\vec{q}\lambda} + \hat{\mathbf{a}}_0^\dagger e^{-i\vec{q}\lambda}]$$

Druhé kvantování → stavy elmag. pole (diskrétní verze) →
→ j -tý mod.

$$\hat{\mathbf{A}}^\dagger(q_j, \lambda_j) |N_1, \dots, N\rangle = (n_j + 1)^{1/2} |N_1, \dots, N_{j+1}, \dots\rangle$$

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\text{systém}} \otimes \mathcal{H}_{\text{pole}}$$